

**Numerické modelování šíření
znečišťujících látek v ovzduší**
Numerical modelling of air pollution

Zadání diplomové práce

Student:

Bc. Václav Ryška

Studijní program:

N2647 Informační a komunikační technologie

Studijní obor:

1103T031 Výpočetní matematika

Téma:

Numerické modelování šíření znečišťujících látek v ovzduší

Numerical modelling of air pollution

Zásady pro vypracování:

Zpracování diplomové práce vyžaduje důkladné studium a další rozpracování některých témat, které s danou problematikou úzce souvisejí. Práci lze proto rozvrhnout do následujících tří kroků:

1. Numerické modely proudění tekutin a jejich využití pro modelování šíření znečišťujících látek.
2. Fyzikálně-chemické modely šíření znečišťujících látek.
3. Nasazení modelů znečištění ovzduší pro reálné situace.

Výstupem diplomové práce by měla být analýza nástrojů numerického modelování znečištění ovzduší, zpracování základních fyzikálních a chemických modelů šíření kontaminantů a jejich integrace do softwarového nástroje.

The work on diploma thesis includes study and further development of selected tasks, which are closely related to given domain. The thesis can be therefore divided into following three steps:

1. Numerical models of fluid dynamics and their application to air pollution modelling.
2. Physical-chemical models of transport of contaminants.
3. Implementation of air pollution models for testing on realistic situations.

The output from diploma thesis will be analysis of tools for numerical modelling of air pollution, physical and chemical models for contaminants transport and their integration into software tool.

Seznam doporučené odborné literatury:

C. Johnson: Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method, Dover Publications, 2009.

S. Drábková et. al.: Mechanika tekutin. Učební text VŠB-TU Ostrava, 2007.

M. Kozubková: Modelování proudění tekutin - Fluent, CFX. Učební text VŠB-TU Ostrava, 2008.

M. Brandner, J. Egermaier, H. Kopincová: Numerické metody pro řešení evolučních parciálních diferenciálních rovnic. Učební text VŠB-TU Ostrava, 2012.

Formální náležitosti a rozsah diplomové práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

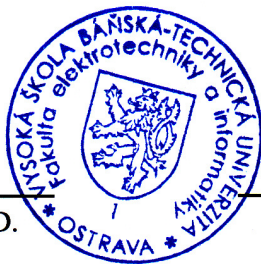
Vedoucí diplomové práce: **doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.**

Datum zadání: 01.09.2014

Datum odevzdání: 07.05.2015



doc. RNDr. Jiří Bouchala, Ph.D.
vedoucí katedry



prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.
děkan fakulty

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně. Uvedl jsem všechny literární prameny a publikace, ze kterých jsem čerpal.

Ve Frýdku-Místku 7. května 2015

.....

Na tomto místě bych chtěl poděkovat doc. Mgr. Vítu Vondrákovi, Ph.D. za ochotu, podporu a poskytnuté rady při tvorbě této práce. Dále bych rád poděkoval Ing. Tomášovi Brzobohatému, Ph.D. a Ing. Martinu Hasalovi za cenné rady při tvorbě numerického modelu. Další, komu patří mé poděkování, je Ing. Michal Podhorányi, Ph.D. za poskytnutí geografických dat. A v neposlední řadě děkuji své rodině, která mi byla po celou dobu studií velkou oporou.

Abstrakt

Tato práce se zabývá numerickým modelováním znečištění ovzduší ve 3D. Popisuje numerický model proudění tekutin a fyzikálně-chemický model šíření znečišťující látky ovzduším. Oba tyto modely jsou implementovány v jazyce MATLAB[®] pomocí konečných diferencí a jsou schopny modelovat znečištění ovzduší v přirozené krajině popsané standardními geografickými daty z geoinformačních systémů.

Klíčová slova: numerické modelování, Stokesovy rovnice, konvekčně-difúzní rovnice, znečištění ovzduší, 3D, MATLAB[®], konečné difference

Abstract

This thesis deals with numerical modeling of an air pollution in 3D. It describes numerical model of fluid dynamics and physical-chemical model of transport of contaminants throughout an air. Both of these models are implemented in MATLAB[®] language by finite differences and they are able to model air pollution in natural landscape described by standard geodata from geoinformation systems.

Keywords: numerical modeling, Stokes equations, convection-diffusion equation, air pollution, 3D, MATLAB[®], finite differences

Seznam použitých zkratk a symbolů

MKD	– metoda konečných diferencí
MKP	– metoda konečných prvků
MKO	– metoda konečných objemů
PM	– Particulate Matter - prachové částice
PDR	– parciální diferenciální rovnice
VOC	– Volatile Organic Compound - těkavá organická látka
TIFF	– Tagged Image File Format
CFD	– Computational Fluid Dynamics - výpočetní dynamika tekutin

Obsah

1	Úvod	3
2	Základní pojmy a principy	5
2.1	Vlastnosti a rozdělení tekutin	5
3	Modelování proudění tekutin	7
3.1	Rovnice kontinuity	9
3.2	Eulerova rovnice	9
3.3	Navier-Stokesova rovnice	10
3.4	Stokesova rovnice	11
4	Modelování šíření znečištění	14
4.1	Konvekčně-difúzní rovnice	16
5	Numerické řešení	21
5.1	Diferenční metody	21
5.2	Řešení Stokesovy rovnice	27
5.3	Řešení konvekčně-difúzní rovnice	39
5.4	Aplikace terénu	42
6	Numerické experimenty	45
6.1	Srovnání numerických modelů proudění tekutin	45
6.2	Srovnání numerických modelů proudění tekutin v úloze s překážkou . . .	45
6.3	Šíření pevných částic	51
7	Závěr	54
8	Reference	56
	Přílohy	58
A	Fyzikálně-chemický model - animace	59

Seznam obrázků

3.1	Rychlostní profil proudění reálné tekutiny potrubím	8
3.2	Oblast Ω s průtočnými hranicemi Γ_I a Γ_O	12
4.1	Ilustrace difúze	17
4.2	Oblast Ω	19
5.1	Ilustrace krychle pokryté pravidelnou ekvidistantní sítí	22
5.2	Buňka diskretizační sítě pro řešení Stokesovy rovnice	28
5.3	Řezy výpočetní sítě rovinami určenými pomocí souřadnicových os	29
5.4	Schémata využitá pro aproximaci Stokesových rovnic pomocí konečných diferencí	31
5.5	Ilustrace uzlů sítě přímo ovlivněných okrajovými podmínkami	32
5.6	Aplikace okrajové podmínky na outletu	33
5.7	Aplikace okrajové podmínky pro neznámou u na spodní stěně	34
6.1	Rychlostní profil vypočtený numerickým modelem implementovaným v Matlabu	46
6.2	Rychlostní profil vypočtený v Comsolu	46
6.3	Rychlostní profil s překážkou - pohled shora	47
6.4	Rychlostní profil s překážkou - pohled shora (Comsol)	47
6.5	Rychlostní profil s překážkou - pohled ze strany	48
6.6	Rychlostní profil s překážkou - pohled ze strany (Comsol)	48
6.7	Rychlostní profil s překážkou	49
6.8	Rychlostní profil s překážkou (Comsol)	49
6.9	Rozdíl norem rychlostí s překážkou - horizontální řez ve výšce 50m	50
6.10	Rozdíl norem rychlostí s překážkou - vertikální řez nad překážkou	50
6.11	Stav znečištění částicemi PM_{10} v čase 240 sekund.	52
6.12	Stav znečištění částicemi PM_{10} v čase 240 sekund - pohled shora	52
6.13	Stav znečištění částicemi PM_{10} v čase 240 sekund - pohled ze strany	53

1 Úvod

Kvalita ovzduší bezesporu významně ovlivňuje život všech živých organismů na Zemi, které využívají na buněčné úrovni zpravidla čistý kyslík. Takže logicky, čím více je atmosféra znečištěná, tím více úsilí musí organismy obecně vynaložit, aby vzduch zpracovaly.

Lidé se se znečištěním ovzduší ve větší míře začali potýkat od dob průmyslové revoluce, kdy se spalování fosilních paliv stalo nezbytným. Průmyslová výroba je v současné době k životnímu prostředí mnohem šetrnější než tehdy, nicméně její celkový objem se zvýšil, takže téma znečištění ovzduší je stále aktuální a často diskutované. Dalším zásadním přelomem pro zhoršení kvality ovzduší se stal rozmach dopravy, jelikož výfukové plyny dopravních prostředků obsahují značné množství toxických látek i skleníkových plynů.

V současnosti se množství škodlivých emisí velice důkladně monitoruje a reguluje, což souvisí s požadavkem na vysokou kvalitu životního prostředí. Jednou z významných metod pro výzkum v oblasti šíření znečištění je jeho numerické modelování, které je hlavním tématem této práce. V souvislosti se znečišťováním ovzduší budu používat obecně známé pojmy. Pokud by si přesto čtenář nebyl jistý, co daným termínem rozumím, může podrobnější popis najít v mé bakalářské práci [4].

Jedním z cílů této diplomové práce je seznámení s numerickými nástroji pro modelování proudění tekutin a jejich hlubší analýza. S tím úzce souvisí důkladné prostudování a pochopení teoretických poznatků, na kterých se tyto modely zakládají. Dále si práce klade za cíl popsat, jak se tyto modely využívají k modelování šíření kontaminantů ovzduším. Dalším cílem je zpracování základních fyzikálně-chemických modelů a jejich integrace do softwarového nástroje. Existuje řada numerických nástrojů pro modelování proudění, ale hlavním zájmem je získat řešení v co nejkratším čase s rozumnou mírou přesnosti a rozlišení. V operativním nasazení při modelování úniku kontaminantu do ovzduší (např. havárie) je prioritou rychlost oproti robustnosti a vysoké úrovni přesnosti.

Druhá kapitola popisuje vlastnosti tekutin, které jsou důležité pro modelování jejich proudění, a jejich rozdělení na základě těchto vlastností. Zavádí pojem viskozity a vysvětluje rozdíl mezi ideální a skutečnou tekutinou.

Třetí kapitola se věnuje modelování proudění, objasňuje kritéria, na základě kterých proudění tekutin dělíme. Dále jsou zde uvedeny rovnice používané pro popis proudění včetně jejich fyzikálního významu a nejčastěji používaných okrajových podmínek, které jsou nezbytné pro formulaci a získání řešení jednotlivých úloh.

Ve čtvrté kapitole je popsáno, jak budeme modelovat šíření samotného znečištění. Nejprve se seznámíme s látkami, které jsou u nás nejčastější příčinou znečištění atmosféry, uvedeme jejich zdroje i dopady na lidský organizmus. Dále se budeme věnovat i

fyzikálním dějům, které probíhají, když se kontaminanty šíří ovzduším a uvedeme jejich matematický popis včetně okrajových podmínek používaných pro získání korektně naformulované úlohy.

Pátá kapitola vysvětluje principy diferenčních metod, které budu používat k vytvoření numerických modelů proudění tekutin i k tvorbě fyzikálně-chemických modelů šíření znečišťujících látek. Podrobně objasním způsob, jakým se obecné matematické rovnice popisující výše uvedené modely upraví pro potřeby následné implementace v programovacím jazyce. Detailně ukážu i způsob, jakým se v těchto modelech aplikují okrajové podmínky. A na závěr kapitoly popíši, jakým způsobem jsem do jednotlivých modelů zahrnul profil přírodního reliéfu.

V šesté kapitole jsou uvedeny 3 numerické experimenty, které ukazují výsledky jednotlivých modelů na modelových úlohách. První 2 experimenty srovnávají vymodelovaný rychlostní profil s profilem vypočteným pomocí CFD modulu nástroje Comsol Multiphysics[®]. Poslední experiment ukazuje fungování fyzikálně-chemického modelu.

2 Základní pojmy a principy

Než přistoupíme k samotnému modelování šíření znečišťujících látek v prostředí, je potřeba popsat a vysvětlit matematický aparát a prostředky, které budeme používat. Následující podkapitoly shrnují poznatky načerpané z knihy o mechanice kontinua [1] a skript zabývajících se mechanikou tekutin [2]. Práce se zabývá šířením znečišťující látky ovzduším - tedy plynem (obecně *tekutinou*).

2.1 Vlastnosti a rozdělení tekutin

Oproti pevným látkám se tekutiny v mnohém liší. Jejich molekuly na sebe navzájem působí ve srovnání s pevnými látkami mnohem menšími přitažlivými silami, a proto nemají stálý tvar (mnohdy ani objem) lze je snadno dělit a deformují se vždy nevratně.

První charakteristickou vlastností tekutin je *viskozita* (*vazkost*). Ta je někdy také nazývána vnitřním třením tekutiny, jelikož působí tak, že zmenšuje rozdíl vzájemných rychlostí uvnitř proudící tekutiny, což připomíná síly vznikající při tření. Obecně se viskozita projevuje, když tekutina působením vnějších sil není v rovnováze. Naopak, pokud tekutina v rovnováze je, tak se síly viskozity neuplatňují.

Představme si nyní proudící tekutinu, jejíž jednotlivé vrstvy se pohybují různými rychlostmi. Na rozhraní každých dvou takových vrstev pak vzniká tečné (smykové) napětí bránící jejich vzájemnému pohybu. Podle Newtonova zákona viskozity podrobněji v [6] lze toto napětí vyjádřit následující rovnicí

$$\tau = \eta \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (2.1)$$

kde η je *dynamická viskozita* a $\frac{\partial v}{\partial y}$ je růst rychlosti ve směru kolmém na směr pohybu tekutiny. Jednotkou je [Pa.s]. Převrácenou hodnotu dynamické viskozity nazýváme *tekutost*. Podílem dynamické viskozity a hustoty

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}, \quad (2.2)$$

získáme *kinematickou viskozitu*, jejíž jednotkou je [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]. Jak dynamická tak kinematická viskozita závisí na druhu tekutiny a jejich hodnoty jsou často pro většinu tekutin získávány experimentálně. Viskozita obvykle závisí na teplotě a tlaku. U plynů viskozita s rostoucí teplotou roste, kdežto u kapalin naopak klesá. Vliv tlaku lze pro viskozitu plynů zpravidla zanedbat, naproti tomu viskozita kapalin roste s tlakem zhruba přímo úměrně.

Další (pro popis) důležitou vlastností tekutin je jejich stlačitelnost. Ta je definována jako záporná hodnota relativní změny objemu vzhledem ke změně tlaku:

$$\gamma = -\frac{1}{V} \frac{\Delta V}{\Delta p} \quad (2.3)$$

kde V je původní objem tekutiny před stlačením, ΔV představuje změnu objemu při stlačení a Δp je změna tlaku. Detailní definici lze nalézt například v [7]. Kapaliny a plyny se z hlediska stlačitelnosti chovají velice odlišně. Zatímco objem kapalin se působením vnějších tlakových sil mění jen velice nepatrně, plyny jsou stlačitelné snadno. Plyny se snaží vyplnit celý prostor, do něhož mohou proniknout, kdežto kapaliny, pokud nezaplní celý dostupný prostor, vytvářejí volnou hladinu a snaží se při daném objemu zachovat co nejmenší povrch. Za jistých podmínek, které si uvedeme později, však lze i proudění plynů modelovat jako nestlačitelné proudění.

Z hlediska viskozity tedy můžeme rozdělit tekutiny na vazké (s vnitřním třením) a nevazké (bez vnitřního tření). Co do stlačitelnosti pak na stlačitelné a nestlačitelné. Vezmeme-li v úvahu skupenství, rozlišujeme kapaliny a plyny.

Hydromechanika zavádí pojem dokonalé nebo také *ideální kapalina*, což umožňuje snadnější odvození některých zákonitostí, jelikož ideální kapalina je dokonale nestlačitelná a bez jakéhokoliv vnitřního tření. Stejně tak je zaveden i *ideální plyn*, jenž se stejně jako ideální kapalina vyznačuje absencí vnitřního tření, ale je dokonale stlačitelný.

3 Modelování proudění tekutin

Proudění skutečných tekutin je velice složitý proces, a proto je jeho matematické po-
tažmo numerické modelování velice náročné. Z tohoto důvodu se pro popis a modelo-
vání proudění zavádějí při splnění určitých podmínek různá zjednodušení. Tato kapitola
inspirována publikacemi o mechanice kontinua [1] a tekutin [2] objasní, jakým způso-
bem a podle jakých kritérií se dělí proudění tekutin a která zjednodušení jsou pro naše
potřeby aplikovatelná. Čerpal jsem také z učebních textů o modelování proudění tekutin
[3] a [18]. Využil jsem opět i poznatky z diplomové práce [5]. Dále budou popsány zá-
kladní rovnice, ze kterých budu vycházet při výpočtu vektorového pole rychlostí prou-
dicí tekutiny. Jejich odvození přesahuje rámec této práce, nicméně považuji za důležité
poukázat na klíčové fyzikální a matematické principy, z nichž tyto rovnice vycházejí. Na
závěr budou diskutovány volby okrajových podmínek v kontextu řešitelnosti jednotli-
vých úloh.

Proudění můžeme klasifikovat podle dimenze oblasti, ve které se tekutina pohybuje,
na:

- **jednorozměrné (1D)** - proudění po křivce s ($v = v(s)$),
- **dvourozměrné neboli rovinné (2D)** - veličiny (např. rychlost) závisí na poloze v
rovině $v = v(x, y)$,
- **trojrozměrné neboli prostorové (3D)**, kde se hodnoty veličin mění v závislosti na
poloze v prostoru $v = v(x, y, z)$.

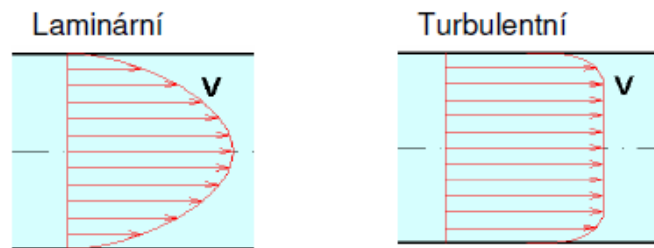
Z hlediska závislosti na čase dělíme proudění na:

- *ustálené* (stacionární), kde veličiny nezávisí na čase $v \neq v(t); \frac{\partial}{\partial t} = 0$,
- *neustálené* (nestacionární), které je závislé na čase $v = v(t)$.

Pro reálnou (vazkou) tekutinu pak rozlišujeme proudění:

- *laminární*, kdy se trajektorie jednotlivých částic vzájemně neprotínají, sousední vrstvy
tekutiny po sobě pouze kloužou, ale nemísí se,
- *turbulentní*, kdy se naopak částice navzájem mísí a kromě podélné rychlosti mají
i turbulentní rychlost, kterou se přemísťují ještě jiným směrem, než kam proudí
tekutina.

Oba tyto druhy proudění se dále liší mj. rychlostním profilem nebo odporem proti
pohybu. Na příkladu proudění uvnitř potrubí (viz Obrázek 3.1 z výše citovaných skript



Obrázek 3.1: Rychlostní profil proudění reálné tekutiny potrubím

o mechanice tekutin [2]) vidíme, že rychlostní profil laminárního proudění má tvar rotačního paraboloidu. Rychlosti částic při turbulentním proudění se vyrovnávají díky intenzivnímu přemísťování, takže rychlostní profil turbulentního proudění se podobá obdélníku.

Skutečnost, zda je proudění laminární či turbulentní se určuje pomocí *Reynoldsova čísla*, které se používá v teorii podobnosti, jelikož, jak je uvedeno na stránce [8], udává poměr mezi setrvačnými silami a viskozitou. Dvěma mechanicky podobným prouděním přísluší totéž Reynoldsovo číslo. Jeho hodnota se vypočte ze vztahu:

$$Re = \frac{vd}{\nu}, \quad (3.1)$$

kde v je střední rychlost tekutiny [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$], d udává charakteristický rozměr [m] (např. hydraulicky poloměr blíže popsany např. v [9] charakterizující průřez potrubí, koryta řeky aj. a ν představuje kinematickou viskozitu proudící tekutiny [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]). Vyjádříme-li jednotky v rovnici (3.1), zjistíme, že Reynoldsovo číslo je bezrozměrná veličina. Malým Reynoldsovým číslem odpovídají laminární proudění, kdy převažuje vnitřní tření tekutiny, při větších hodnotách jsou proudění turbulentní, díky převaze setrvačných sil.

Přechod z laminárního v turbulentní (jak si z rovnice (3.1) dovedeme snadno představit) může být způsoben kupříkladu zvýšením rychlosti proudění nebo snížením viskozity tekutiny a nastává při tzv. kritické hodnotě Reynoldsova čísla Re_k . Ta se pohybuje v rozmezí stovek až několika málo tisíců a závisí z velké části například na geometrii úlohy (externí/interní proudění, tvar koryta/potrubí apod.) či drsnosti povrchů, s nimiž přichází tekutina během proudění do styku.

Než se seznámíme s rovnicemi, které popisují proudění tekutin, zavedu ještě několik potřebných pojmů. Prvním z nich je tzv. „operátor“ *nabla*:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (3.2)$$

s jehož pomocí můžeme vyjádřit *gradient* skalární funkce $p(x, y, z)$ v prostoru ¹:

$$\nabla p = \text{grad } p = \left(\frac{\partial p}{\partial x}, \frac{\partial p}{\partial y}, \frac{\partial p}{\partial z} \right). \quad (3.3)$$

Dále budeme používat *divergenci* vektorové funkce $\mathbf{u} = (u, v, w)^2$:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} := \text{div } \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.4)$$

a Laplaceův operátor:

$$\Delta \mathbf{u} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}. \quad (3.5)$$

3.1 Rovnice kontinuity

Rovnice kontinuity (někdy také rovnice spojitosti) vyjadřuje obecně platný fyzikální zákon zachování hmotnosti. Odvození rovnice kontinuity je popsáno v knize o mechanice kontinua [1] a skriptech o mechanice tekutin [2] resp. [10]. V diferenciálním tvaru můžeme rovnici kontinuity vyjádřit jako:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.6)$$

kde ρ vyjadřuje hustotu tekutiny, t je čas a rychlostí u se tekutina pohybuje. První člen rovnice udává změnu hmotnosti v čase, druhý člen pak konvektivní změnu. V případě stacionárního proudění platí $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Pokud navíc uvažujeme nestlačitelné proudění, je hustota konstantní ($\rho = \text{konst.}$) a rovnici kontinuity pro ustálené nestlačitelné proudění můžeme zapsat ve tvaru:

$$\text{div } \mathbf{u} = 0. \quad (3.7)$$

3.2 Eulerova rovnice

Eulerova rovnice popisuje rovnováhu sil působících na proudící ideální tekutinu. Vektorově vyjádřena má tato rovnováha tvar:

$$\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_o + \mathbf{F}_p, \quad (3.8)$$

kde \mathbf{F}_o značí hmotnostní (objemové) síly, které působí na tekutinu z vnějšku (v našem případě především gravitace) \mathbf{F}_p pak reprezentuje tlakové síly (působící uvnitř tekutiny). Součet těchto 2 druhů sil odpovídá setrvačným silám \mathbf{F}_s pohybujících se částic ideální tekutiny. Aplikací těchto sil na elementární objem a sérií úprav (podrobněji opět ve

¹ $p : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$

² $\mathbf{u} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$

skriptech [2] a [10]) dostaneme diferenciální tvar Eulerovy rovnice pro proudění ideální tekutiny:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (3.9)$$

kde \mathbf{u} značí rychlost, t je čas, p reprezentuje tlak a ρ hustotu. Co se týče jednotlivých členů rovnice, tak \mathbf{g} vyjadřuje zrychlení objemové síly (většinou jen tíhové zrychlení), první člen na levé straně popisuje zrychlení, druhý představuje konvektivní zrychlení. Poslední člen reprezentuje tlakové pnutí uvnitř tekutiny.

3.3 Navier-Stokesova rovnice

Rovnováhu sil působících na proudící skutečnou tekutinu vyjadřuje Navier-Stokesova rovnice. Vektorový zápis této rovnováhy říká, že setrvačná síla je rovna součtu hmotnostní, tlakové a třecí síly a vypadá následovně:

$$\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_o + \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_t. \quad (3.10)$$

Jak již víme, oproti ideální tekutině působí uvnitř reálné tekutiny vnitřní tření, proto rovnice pro skutečnou tekutinu (3.10) rozšiřuje (3.8) o člen reprezentující třecí sílu \mathbf{F}_t , kterou můžeme vyjádřit vztahem (2.1), což se pochopitelně projeví i v diferenciálním tvaru Navier-Stokesovy rovnice, jenž pro nestlačitelnou tekutinu³ vypadá následovně

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{u}. \quad (3.11)$$

Podrobnější postup odvození opět možno najít v již výše citovaných publikacích [1],[2] a [10]. Rovnice se liší od dříve uvedené Eulerovy rovnice (3.9) oproti níž na pravé straně přibyl člen reprezentující sílu potřebnou k překonání vazkých třecích sil uvnitř tekutiny. Rychlost opět značíme \mathbf{u} , t je čas, p reprezentuje tlak, ρ hustotu, ν kinematickou viskozitu a \mathbf{g} vyjadřuje zrychlení objemové síly.

Rovnici (3.11) lze rozepsat ve 3D následovně i jako soustavu rovnic:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = g_1 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = g_2 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = g_3 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right), \quad (3.14)$$

kde $\mathbf{u} = (u, v, w)$, $\mathbf{g} = (g_1, g_2, g_3)$ jsou vektorové funkce rychlosti a objemového (tíhového) zrychlení se složkami ve směrech os x, y, z , $p(x, y, z)$ chápeme jako skalární funkci tlaku.

³Pro nestlačitelnou tekutinu platí $\rho = \text{konst.}$ a rovnice kontinuity se redukuje na (3.7)

3.4 Stokesova rovnice

Pro modelování stacionárních laminárních proudění (anglicky creeping flows) s nízkým Reynoldsovým číslem se používá stacionární Stokesova rovnice:

$$-\mu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \quad (3.15)$$

kde μ je dynamická viskozita tekutiny, \mathbf{u} značí rychlost, p tlak a \mathbf{f} reprezentuje objemové síly podobně jako u Navier-Stokesovy rovnice. Rovnice (3.15) je stacionárním ($\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} = 0$) linearizovaným $\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} = 0$ případem Navier-Stokesovy rovnice (3.11) a podrobnější informace o ní můžeme dohledat v knize o numerickém řešení PDR pomocí MKP [16].

Rovnici (3.15) můžeme rozepsat ve 3D na soustavu lineárních rovnic (3.16), (3.17), (3.18) analogicky jako u Navier-Stokesovy rovnice (3.11):

$$-\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) + \frac{\partial p}{\partial x} = -f_1 \quad (3.16)$$

$$-\mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) + \frac{\partial p}{\partial y} = -f_2 \quad (3.17)$$

$$-\mu\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) + \frac{\partial p}{\partial z} = -f_3, \quad (3.18)$$

kde $\mathbf{u} = (u, v, w)$, $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)$ jsou vektorové funkce rychlosti a objemové síly se složkami ve směrech os x, y, z , $p(x, y, z)$ reprezentuje skalární funkci tlaku.

Řešíme-li proudění nestlačitelné tekutiny, určujeme rozložení rychlostí a tlaků. Což ve 3D znamená 4 neznámé - 3 složky rychlosti a tlak (hustotu ρ uvažujeme konstantní a chápeme ji jako stavovou rovnici). Pro určení neznámých využijeme 4 výše uvedené rovnice - 3 pohybové rovnice (3.16), (3.17), (3.18) a rovnici kontinuity (3.6). Ve tvaru (3.7) se rovnice kontinuity označuje jako tzv. podmínka nestlačitelnosti.

Okrajové a počáteční podmínky

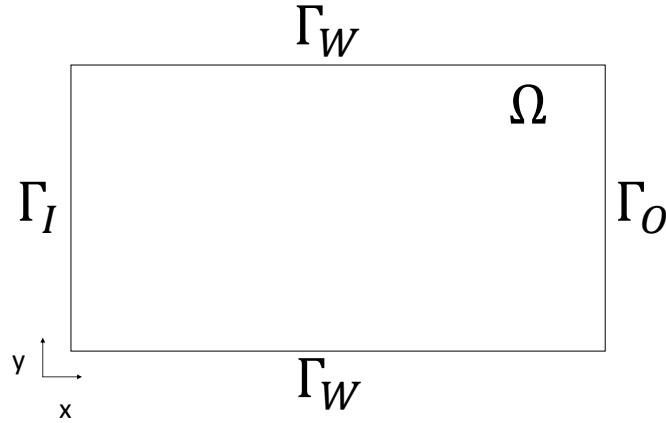
Pro popis okrajových podmínek využijeme modelovou uzavřenou oblast Ω na obrázku 3.2. Dále uvažujeme prostorový vektor $\mathbf{x} = (x, y)$, vektorovou proměnnou rychlosti $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t))$ a tlakovou proměnnou $p(\mathbf{x}, t)$. Pro hranice oblasti Ω platí

$$\partial\Omega = \Gamma_I \cup \Gamma_O \cup \Gamma_W$$

$$\Gamma_I \cap \Gamma_O \cap \Gamma_W = \emptyset$$

V této práci budu používat:

- *Dirichletovu* okrajovou podmínkou, kdy je zadána přímo hodnota příslušné veličiny (např. $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_I(t)$, $\mathbf{x} \in \Gamma_I$)



Obrázek 3.2: Oblast Ω s průtočnými hranicemi Γ_I a Γ_O

- *Neumannovu* okrajovou podmínkou, kdy zadáváme hodnotu derivace dané veličiny ve směru normály k hranici
(např. $\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial n} = \mathbf{u}_O(t), \mathbf{x} \in \Gamma_O$).

Při modelování proudění budu zadávat 2 průtočné hranice (tzv. *inlet* Γ_I pro „vstupní“ hranici, kudy tekutina přitéká dovnitř oblasti a *outlet* Γ_O na „výstupní“ hranici, skrz kterou tekutina odtéká ven z modelované oblasti).

Kombinace okrajových podmínek na průtočných hranicích nemůže být z důvodu zachování numerické stability libovolná. Například nelze zadat rychlost na inletu i outletu zároveň, jelikož rychlosti na opačné průtočné hranici se počítá z rovnice kontinuity. Naproti tomu pokud je na inletu zadán tlak, musí být zadán i na outletu. Dále je například možné zadat pro ustálené proudění jeho rychlost na inletu a derivaci rychlosti podle normály spolu s tlakem na outletu. Přehled základních kombinací okrajových podmínek podle [3] a [13] na průtočných hranicích je uveden v tabulce 3.1. Vidíme, že na výstupu se vždy zadává tzv. „statický“ tlak, pro který platí:

$$p_{tot} = p_{st} + \frac{1}{2}\rho v^2, \quad (3.19)$$

kde p_{tot} je totální (celkový) tlak, p_{st} je již zmíněný statický tlak, ρ značí hustotu a v velikost rychlosti tekutiny.

Dalším typem okrajových podmínek je okrajová podmínka typu stěna (v anglicky psané literatuře „wall“ nebo také „no-slip“ boundary condition) která se používá na pevných stěnách (v našem případě na Γ_W), kdy normálová složka rychlosti vzhledem ke stěně je nulová

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0, \mathbf{x} \in \Gamma_W, \mathbf{n} \perp \Gamma_W$$

tekutina	vstup	výstup
nestlačitelná tekutina $\rho = \text{konst.}$	rychlost statický tlak celkový tlak hmotnostní tok	statický tlak statický tlak statický tlak statický tlak
stlačitelná tekutina $\rho \neq \text{konst.}$	hmotnostní tok celkový tlak	statický tlak statický tlak

Tabulka 3.1: Některé numericky stabilní kombinace okrajových podmínek na průtočných hranicích

a tečná složka má stejnou rychlost jako stěna (v případě statické stěny nulovou)

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{t} = \mathbf{u}_W(t), \mathbf{x} \in \Gamma_W, \mathbf{t} \parallel \Gamma_W.$$

Pokud modelujeme proudění s vysokým Reynoldsovým číslem, tak podle [3] okrajové podmínky tohoto typu podstatně snižují nároky na výpočet při zachování dostatečně přesného řešení. V případě proudění s malým Reynoldsovým číslem však tento typ okrajové podmínky vhodný není. Tečné rychlosti se zadávají totožné s rychlostmi zdi, normálová rychlost je nastavena na nulu.

V případě nestacionárního proudění je potřeba zadat také počáteční podmínku v čase $t = 0$ na celé oblasti Ω

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega.$$

Jak jsem již uvedl dříve, i proudění vzduchu lze za jistých podmínek modelovat jako nestlačitelné. Pro určení těchto podmínek je nezbytné zavést pojem *Machova čísla*, které je definováno vztahem:

$$Ma = \frac{u}{c}, \quad (3.20)$$

udává poměr mezi rychlostí toku média u a rychlostí zvuku c , který se šíří daným médiem. Z rovnice (3.20) vidíme, že se jedná o bezrozměrnou veličinu.

Pokud je Machovo číslo proudící tekutiny menší než cca 0.2 – 0.3, pak můžeme stacionární proudění považovat za nestlačitelné, aniž bychom se dopustili výraznější chyby (viz [14] a [15]). Přičemž dobrou aproximací nestlačitelného proudění rozumíme takové, u kterého relativní změna hustoty nepřesáhne 5%. Jinými slovy, pokud se plyny v porovnání s lokální akustickou rychlostí pohybují pomalu, můžeme jejich stlačitelnost zanedbat. V praxi se rychlost zvuku ve vzduchu za běžných meteorologických podmínek pohybuje kolem 330 – 340 metrů za sekundu. Což nám pro potřeby modelování proudění vzduchu v našich zeměpisných šířkách umožňuje bez problému zanedbat jeho stlačitelnost, jelikož nejvyšší dosud zaznamenaný poryv větru na území ČR měl podle [17] rychlost 60 metrů za sekundu. Machovo číslo pro tento poryv je přibližně 0.2.

4 Modelování šíření znečištění

Znečištění ovzduší je momentálně velice diskutované téma nejen v regionu především proto, že může mít znatelné dopady na zdraví obyvatelstva a životní prostředí. Modelování jeho šíření nám může pomoci například při konstrukci imisních map, předpovědi kvality ovzduší nebo ekologických haváriích.

Znečišťující látky (někdy také polutanty) jsou chemické a jiné látky, které pokud se nacházejí v daném prostředí, tak škodí živočichům, lidskému zdraví nebo životnímu prostředí. Znečišťující látky můžeme rozdělit z několika hledisek. Rozlišujeme, zda znečištění ovzduší vzniká činností člověka (např. průmyslové exhalace, chemické znečištění) nebo přirozeně (např. písečná bouře, lesní požár). Dále dělíme polutanty na pevné (prachové) částice, kapalně kapky a plyny. Co se týče způsobu vzniku, můžeme rozlišovat ještě primární a sekundární polutanty. Primární se uvolňují přímo z nějakého zdroje (např. oxidy uhlíku jakožto vedlejší produkty spalování) kdežto sekundární (např. vznik ozonu v troposféře jako důsledku chemické reakce se světlem) vznikají reakcemi primárních polutantů mezi sebou případně s jinými látkami. Tyto reakce není možno do modelu, kterým se budu v této práci zabývat, prakticky nijak zahrnout. Dále si uvedeme nejčastěji se vyskytující polutanty. Z hlediska modelování můžeme tyto polutanty rozlišit pomocí difúzního koeficientu popsaného blíže v kapitole 4.1.

Polétavý prach (PM_x)

Polétavý prach (PM_x z anglického „particulate matter“) jsou mikroskopické částice pevného skupenství, které mohou být unášeny vzduchem. Polétavý prach se v důsledku toho, jak působí na lidské zdraví, dělí nejčastěji na 4 frakce podle velikosti (PM_{10} , $PM_{2,5}$, PM_1 a $PM_{0,1}$) kde čísla udávají velikost největších částic dané skupiny v mikrometrech. Toto dělení není zvoleno nikterak náhodně. Čím jsou částice menší, tím hlouběji do lidského těla mohou proniknout a způsobit tak přímo či nepřímo závažná onemocnění počínaje astmatem a rakovinou konče. Uvádí se, že $PM_{2,5}$ propustí dýchací trakt do průdušek, PM_1 se mohou usazovat dokonce až v plicních sklípcích. $PM_{0,1}$ mohou proniknout i do krve a poškodit tak další orgány. S rostoucí velikostí částic se snižuje jejich doba výskytu v ovzduší. Zatímco hrubší částice spadající do PM_{10} se usazují již po několika hodinách od jejich emise, menší částice mohou v ovzduší setrvat několik dnů až týdnů, což následně umožňuje i jejich transport na větší vzdálenosti.

Mezi hlavní zdroje polétavého prachu patří veškeré spalovací procesy, doprava a průmyslová výroba. Z dalších - dříve neuvedených - zdrojů stojí za zmínku ještě sopečné vulkány, které v případě větší erupce také mohou významně ovlivnit kvalitu ovzduší a počasí obecně.

V závislosti na způsobu vzniku se složení pevných částic může značně lišit. Základem bývá popílek saze a horniny, dále jsou ale tyto polutanty na sebe schopny vázat mnoho

jiných (např. pesticidy, těžké kovy, množství chemických sloučenin aj.) a v neposlední řadě i vlhkost, což se může projevit vyšším množstvím srážek.

V souvislosti s polétavým prachem je třeba zmínit i tzv. sekundární prašnost, která je mnohem obtížněji modelovatelná, než znečištění z primárních zdrojů. Sekundární prašnost vzniká především v městských aglomeracích a v okolí staveb tak, že již usazené částice jsou opět rozvřeny do ovzduší vinou větru či automobilové dopravy.

Oxid siřičitý (SO_2)

Oxid siřičitý uniká do atmosféry především jako důsledek spalování uhlí a těžkých olejů dále i při tavení rud s obsahem síry. V globálním měřítku vzniká také činností sopek, ale podíl tohoto zdroje na koncentraci SO_2 v ovzduší nad ČR je minimální. V atmosféře se oxid siřičitý postupně přeměňuje až na kyselinu sírovou, která se potom mísí s aerosoly a následně váže na prachové částice, což zapříčiňuje vznik tzv. kyselých dešťů. Ty mají ničivý dopad na životní prostředí. V minulosti se například podílely na zničení lesů v Jizerských a Krušných horách. U člověka se oxid siřičitý absorbuje z velké části již ve sliznici horních cest dýchacích a způsobuje dýchací obtíže. Od roku 1989 se koncentrace SO_2 v ČR výrazně snížily jakožto důsledek instalace odsiřovacích zařízení a jeho imisní limity jsou tak v dnešní době překračovány velice zřídka.

Oxidy dusíku (NO_x)

Nejvydatnějším zdrojem oxidu dusnatého (NO) je automobilová, železniční i lodní doprava. Ten následně reaguje velmi rychle s ozonem (O_3) i při nízkých koncentracích obou plynů, čímž vzniká zdraví škodlivý oxid dusičitý (NO_2) který podobně jako oxid siřičitý dráždí dýchací cesty, způsobuje jejich onemocnění a oslabuje imunitu. V přírodě vznikají emise oxidů dusíku následkem sopečných erupcí, při bouřkách úderem blesků anebo také z půdy. V Evropě jsou tyto zdroje málo významné, z celosvětového hlediska však hrají větší roli. K překročení imisních limitů (NO_x) dochází zpravidla jen ve větších městech a uvnitř dopravně vytížených lokalit.

Oxidy uhlíku (CO_x)

Oxid uhelnatý CO vzniká jako důsledek nedokonalého spalování zemního plynu, uhlí nebo dřeva. Emitují jej např. automobily, domácí topeniště a energetický i metalurgický průmysl. Oxid uhelnatý snižuje kapacitu krve pro přenos kyslíku v těle tím, že se místo něj váže na hemoglobin. Může tak způsobovat závratě nebo zhoršenou pozornost. V ČR však jen výjimečně přesahuje imisní limity. V atmosféře reaguje s kyslíkem za vzniku oxidu uhličitého (CO_2) - jednoho ze skleníkových plynů.

Amoniak (NH_3)

Amoniak (známý běžně pod triviálním názvem čpavek a vyznačující se charakteristickým zápachem) se používá především jako hnojivo v zemědělství, které je hlavním zdrojem amoniaku unikajícího do atmosféry. Sám o sobě znečišťuje spíše povodí než ovzduší, v ovzduší se však podílí na vzniku sekundárních polutantů. Při vdechování poškozuje sliznice.

Těkavé organické látky (VOC)

Mezi tyto organické látky patří například karcinogenní benzen, toluen nebo formaldehyd. Podobně jako dříve uvedené polutanty, také těkavé organické látky způsobují alergie, respirační obtíže a oslabují celkovou imunitu organismu. Dále také mohou způsobovat poruchu krvetvorby. Nejvýraznějšími zdroji VOC v ovzduší jsou doprava a průmysl (zpracování paliv, chemický).

4.1 Konvekčně-difúzní rovnice

Konvekčně-difúzní rovnice je parciální diferenciální rovnice 2. řádu pomocí které budeme modelovat šíření znečišťující látky ovzduším na oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ a vypadá následovně:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c) - \nabla \cdot (\mathbf{u}c) + R. \quad (4.1)$$

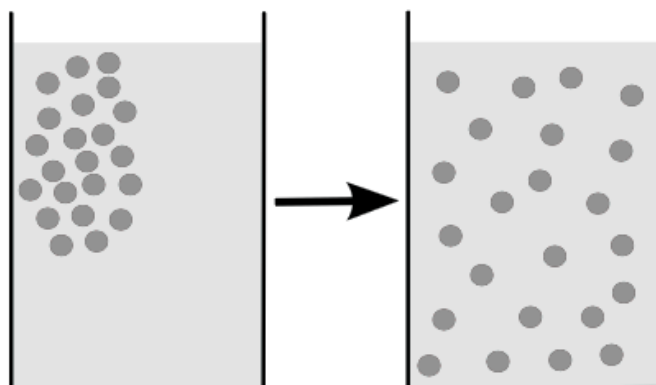
D je vstupní parametr - difúzní koeficient - popisující v našem případě chování jednotlivých polutantů. Jednotkou jsou $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ a jeho hodnota se mění s teplotou prostředí, u pevných částic závisí také na jejich velikosti. Neznámou reprezentující koncentraci znečišťujících látek značíme c a její hodnoty se obecně mění v prostoru i čase a můžeme je vyjádřit v $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ⁴, \mathbf{u} značí vstupní parametr rychlosti v $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, která se také obecně mění v prostoru i čase. R udává zdroje emisí v $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$. I zdrojová funkce závisí na prostorových proměnných ($R = 0$ tam, kde není zdroj znečištění) a může se v čase měnit. Konvekčně-difúzní rovnici lze popsat i jiné procesy než šíření znečištění (např. transport tepla v pohybující se kapalině). Jak již název napovídá, tato rovnice popisuje procesy během kterých probíhají 2 fyzikálně i matematicky odlišné děje - konvekce a difúze.

Konvekce

Konvekce je v našem případě proces, kdy tekutina svým pohybem unáší částice znečišťujících látek. Hmotné látky lze konvekci přenášet pouze v tekutinách na rozdíl od tepla, které lze konvekci šířit i tuhými tělesy. Samotnou konvekci popisuje hyperbolická PDR 1. řádu:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = 0, \quad (4.2)$$

⁴V praxi se však většinou používají $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$.



Obrázek 4.1: Ilustrace difúze

kde c je obecně unášená skalární (stavová) veličina (v našem případě koncentrace znečištění⁵), t značí čas a \mathbf{u} vyjadřuje rychlost. V případě nestlačitelného proudění (vektorové pole rychlostí splňuje podmínku nulové divergence $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ⁶ můžeme rovnici (4.2) psát ve tvaru :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = 0, \quad (4.3)$$

kde veličiny jsou totožné jako v předchozí rovnici. Z termodynamického pohledu chápeme konvekci jako vratný proces, takže má fyzikální smysl i když obrátíme směr toku času.

Difúze

Difúzí (viz obrázek 4.1 ze stránek [30]) označujeme proces, kdy se částice látky přemísťují z míst s větší koncentrací do oblastí, kde je jejich koncentrace nižší (pohybují se ve směru gradientu koncentrace). Matematicky můžeme difúzi vyjádřit parabolickou PDR 2. řádu:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla c) = 0, \quad (4.4)$$

kde veličiny jsou totožné jako v případě konvekčně-difúzní rovnice (4.1) - tedy c koncentrace znečišťující látky, t čas a D difúzní koeficient. Na rozdíl od konvekce není difúze vratný proces. Pokud bychom se chtěli vrátit v čase, nejsme pro difúzi schopni formulovat korektně definovanou úlohu.

S difúzí souvisí difúzní koeficient D , který určuje míru s jakou dané látky (polutanty) v jednotlivých tekutinách difundují. V případě, že je tento koeficient konstantní uvnitř

⁵obecně to je vždy „něco“ vztažené k jednotkovému objemu - hustota energie, hustota hybnosti, měrné teplo apod.

⁶ $\nabla \cdot (\mathbf{u}c) = (\nabla \cdot \mathbf{u})c + \mathbf{u} \cdot \nabla c = 0 + \mathbf{u} \cdot \nabla c$

znečišťující látka	difúzní koeficient [m ² .s ⁻¹]	teplota [K]
pevné částice (PM ₁₀)	3.10 ⁻¹²	300
oxid siřičitý (SO ₂)	13.10 ⁻⁶	300
oxid dusnatý (NO)	18.10 ⁻⁶	300
oxid uhelnatý (CO)	20.10 ⁻⁶	300
oxid uhličitý (CO ₂)	16.10 ⁻⁶	300
amoniak (NH ₃)	28.10 ⁻⁶	300
benzen (C ₆ H ₆)	8.10 ⁻⁶	300

Tabulka 4.1: Přehled difúzních koeficientů některých polutantů ve vzduchu

celé výpočetní oblasti, můžeme difúzní rovnici (4.4) přepsat do následujícího tvaru:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \nabla \cdot \nabla c = \frac{\partial c}{\partial t} - D \Delta c = 0. \quad (4.5)$$

Přehled konkrétních hodnot difúzních koeficientů pro některé významné látky ve vzduchu je uveden v tabulce 4.1. Hodnoty jsem získal z webových stránek [32] a [31]. Hodnotu difúzního koeficientu pro částice PM₁₀ jsem vypočetl podle vztahu z článku [33]. Mnoho dalších hodnot difúzních koeficientů chemických látek šířících se nejen vzduchem je možno najít také v prezentaci [25] a článku [26].

Uvažujeme-li šíření chemické látky s konstantním difúzním koeficientem D nestlačitelnou tekutinou, můžeme rovnici (4.1) na základě úprav popsanych výše přepsat do tvaru:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = D \Delta c + R, \quad (4.6)$$

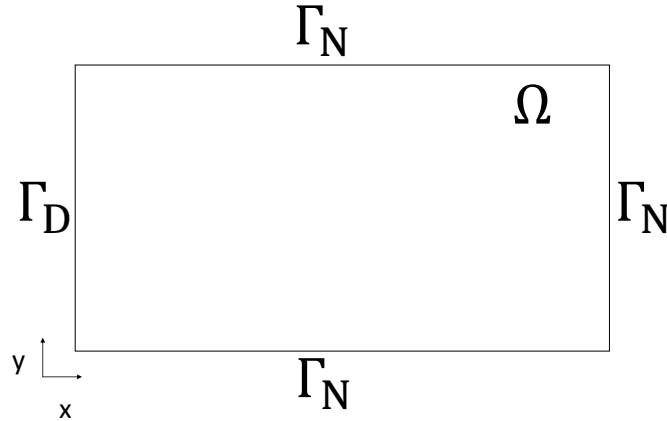
jednotlivé veličiny jsou popsány výše.

Pokud rovnici (4.6) rozepíšeme ve 3D po složkách, tak vypadá následovně:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \left(u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} \right) = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) + R. \quad (4.7)$$

Z tohoto tvaru budeme dále vycházet při konstrukci numerického řešení.

Poznámka 4.1 Proudění tekutiny je vyjádřeno vektorovým polem rychlostí, kdežto rozložení unášených částic polutantů v prostoru je popsáno skalárním polem. Pro modelování šíření znečištění je tedy nejprve nutné získat vektorové pole rychlostí tak, že vyřešíme úlohy proudění (kapitola 3). Tím získáme zmiňované pole rychlostí, které následně použijeme jako vstupní údaj pro modelování šíření znečištění. Vektorové pole rychlostí získáme pro naše potřeby řešením stacionární Stokesovy úlohy pro laminární proudění.

Obrázek 4.2: Oblast Ω

Toto vektorové pole ale můžeme získat i vyřešením jiné náročnější úlohy (např. Navier-Stokesovy) což už je ovšem nad rámec této práce. Dohromady se jedná o tzv. multifyzikální úlohu, kdy se dohromady spojuje řešení více fyzikálních procesů různé povahy. V našem případě se jedná o úlohu slabě sdruženou. To znamená, že oba fyzikální procesy mohou být v tomto případě vždy řešeny nezávisle. Bližší informace o sdružených úlohách lze nalézt např. v habilitační práci [20].

Okrajové a počáteční podmínky

Na závěr kapitoly ještě uvedeme okrajové a počáteční podmínky, které budu dále používat. Podobně jako v případě modelování proudění zavedeme pomocnou uzavřenou oblast Ω (viz obrázek 4.2). Pro hranice oblasti platí

$$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$$

$$\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset.$$

Uvažujeme opět prostorový vektor $\mathbf{x} = (x, y)$ a dále neznámou koncentraci $c(\mathbf{x}, t)$. Počáteční podmínku v čase $t = 0$ budu zadávat typicky jako nulovou koncentraci znečištění

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(t) = 0, \mathbf{x} \in \Omega$$

uvnitř celé modelované oblasti a můžeme ji chápat jako stav před počátkem šíření znečištění (případně stav před havárií apod.). Na hranici budu zadávat podobně jako u modelování proudění:

- *Dirichletovu* okrajovou podmínku

$$c(\mathbf{x}, t) = c_D(t), \mathbf{x} \in \Gamma_D,$$

která fyzikálně znamená, že se na příslušné hranici udržuje konstantní koncentrace znečištění (teplota - tzv. dokonalé chlazení/zahřívání).

- *Neumannovu* okrajovou podmínku, která vyjadřuje funkci normálového toku na hranici

$$\frac{\partial c(\mathbf{x}, t)}{\partial n} = c_N(t), \mathbf{x} \in \Gamma_N,$$

což třeba v případě nulového tepelného toku fyzikálně znamená izolovanou hranici, přes kterou neprochází teplo.

5 Numerické řešení

Problém modelování šíření znečištění ovzduší je typická multifyzikální úloha zahrnující modelování proudění a šíření kontaminantu. Tento typ úloh je známý svou složitostí a prakticky neexistuje ve 3D analytické řešení, a proto v reálných případech není možné použít jiné než numerické řešení. Nicméně ani numerické řešení není snadné nalézt, jelikož modelujeme šíření znečištění nad rozsáhlými oblastmi, navíc počet neznámých značně roste v závislosti na přesnosti, jíž chceme dosáhnout. Mezi dnes běžně využívané numerické metody k řešení takovýchto úloh patří metoda konečných prvků, metoda konečných objemů a metoda konečných diferencí. Metoda konečných diferencí je v porovnání s MKP a MKO jednodušší na implementaci, což byl vzhledem ke skutečnosti, že podobně náročné úlohy řeším poprvé, hlavní důvod, proč jsem zvolil právě ji.

Tato kapitola popisuje postupy a metody, které jsem použil při tvorbě numerických modelů. Na konci kapitoly je pak objasněn princip, jakým modely zpracovávají terén.

5.1 Diferenční metody

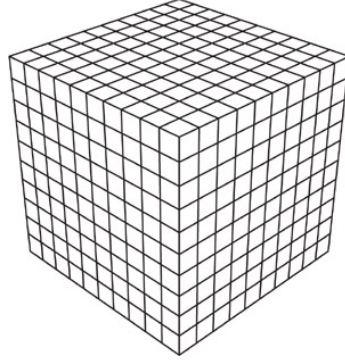
Diferenční metody jsou numerické metody pro řešení diferenciálních rovnic. Při řešení úlohy pomocí diferenčních metod nejprve pokryjeme výpočetní oblast pravidelnou sítí. Následně hodnoty členů diferenciálních rovnic vyjádříme v uzlech této sítě pomocí konečných diferencí, tím získáme rovnice diferenční. Tato podkapitola vychází z poznatků popsaných ve skriptech o lineární algebře s Matlabem [34] a ve skriptech o numerických metodách pro řešení evolučních PDR [35].

5.1.1 Diskretizace

Prvním krokem k získání numerického řešení modelované úlohy je její diskretizace. V případě MKD diskretizace spočívá v pokrytí výpočetní oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ pravidelnou sítí, na níž hledáme složky řešení. Podle dimenze úlohy můžeme oblast rozdělit např. na úsečky (1D), čtverce či obdélníky (2D) nebo na kvádry a krychle (3D). Zde spočívá první zásadní rozdíl například oproti metodě konečných prvků, kde máme mnohem širší paletu elementů, kterými můžeme výpočetní oblast pokrýt. Pokud nebude uvedeno jinak, budeme dále předpokládat pouze *ekvidistantní* síť (tzn. že vzdálenost mezi 2 libovolnými sousedními uzly v kterémkoliv směru je konstantní⁷).

Mějme skalární funkci $c(x, y, z) \in C^3(\Omega)$. Pomocí Taylorova polynomu odvodíme parciální derivace podle prostorových proměnných. Hodnota funkce c v bodě $(x+h, y, z)$

⁷ $\Delta x = x_{i+1} - x_i = h$
 $\Delta y = y_{j+1} - y_j = h$
 $\Delta z = z_{k+1} - z_k = h$
 $h = konst.$



Obrázek 5.1: Ilustrace krychle pokryté pravidelnou ekvidistanční sítí

je

$$c(x+h, y, z) = c(x, y, z) + \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} \frac{h}{1!} + \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} + O(h^3), \quad (5.1)$$

a v bodě $(x-h, y, z)$

$$c(x-h, y, z) = c(x, y, z) - \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} \frac{h}{1!} + \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} + O(h^3), \quad (5.2)$$

kde $O(h^3)$ představuje členy obsahující derivace vyšších řádů.

Pokud z rovnice (5.1) vyjádříme první parciální derivaci získáme následující vztah pro tuto derivaci:

$$\frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} = \frac{c(x+h, y, z) - c(x, y, z)}{h} + O(h). \quad (5.3)$$

Obdobně můžeme vyjádřit první parciální derivaci i z rovnice (5.2):

$$\frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} = \frac{c(x, y, z) - c(x-h, y, z)}{h} + O(h). \quad (5.4)$$

Další možností, jak z rovnic (5.1) a (5.2) můžeme získat vztah pro první parciální derivace, je provést jejich rozdíl a následně opět vyjádřit tuto derivaci:

$$\frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} = \frac{c(x+h, y, z) - c(x-h, y, z)}{2h} + O(h^2). \quad (5.5)$$

Nyní si představme modelový příklad krychle (obrázek 5.1), která je pokryta pravidelnou ekvidistanční sítí s krokem o velikosti h . Přesné hodnoty funkce c v uzlech (x_i, y_j, z_k) označíme $c_{i,j,k} = c(x_i, y_j, z_k)$. Jejich aproximace značíme $C_{i,j,k}$. Dále víme, že sousední uzly jsou od sebe vzdálené o délku kroku h a jejich indexy se v příslušném směru liší o jedničku (např. $C_{i,j,k}$ je od $C_{i,j+1,k}$ vzdálen o h ve směru osy y). Pomocí tohoto značení následně vyjádříme přibližné vztahy pro výpočet první derivace (5.3), (5.4) a (5.5) v okolí bodu (x_i, y_j, z_k) , čímž obdržíme tzv.

dopřednou diferenci

$$\frac{\partial c(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} \approx \frac{C_{i+1,j,k} - C_{i,j,k}}{h} \quad (5.6)$$

zpětnou diferenci

$$\frac{\partial c(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} \approx \frac{C_{i,j,k} - C_{i-1,j,k}}{h} \quad (5.7)$$

a centrální diferenci

$$\frac{\partial c(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} \approx \frac{C_{i+1,j,k} - C_{i-1,j,k}}{2h}. \quad (5.8)$$

Dle odhadů zbytků Taylorova polynomu vidíme, že aproximační chyby pro zpětnou a dopřednou diferenci jsou řádově h , pro centrální diferenci dostáváme aproximační chybu velikosti řádově h^2 .

Pokud místo rozdílů rovnic (5.1) a (5.2) provedeme jejich součet a zanedbáme členy obsahující vyšší derivace, získáme vztah pro druhou parciální derivaci

$$\frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial x^2} = \frac{c(x-h, y, z) - 2c(x, y, z) + c(x+h, y, z)}{h^2} + O(h). \quad (5.9)$$

Odtud pro okolí bodu (x_i, y_j, z_k) dostaneme podobně jako v případě prvních derivací centrální derivaci druhého řádu

$$\frac{\partial^2 c(x_i, y_j, z_k)}{\partial x^2} \approx \frac{C_{i-1,j,k} - 2C_{i,j,k} + C_{i+1,j,k}}{h^2}, \quad (5.10)$$

jejíž chyba je řádu $O(h)$.

Všechny výše uvedené úvahy můžeme pochopitelně analogicky provést i pro parciální derivace podle ostatních prostorových proměnných. Takže například druhou parciální derivaci funkce c podle proměnné z vyjádříme takto

$$\frac{\partial^2 c(x_i, y_j, z_k)}{\partial z^2} \approx \frac{C_{i,j,k-1} - 2C_{i,j,k} + C_{i,j,k+1}}{h^2}.$$

V případě funkce, jejíž hodnota závisí na čase $c(x, y, z, t)$, má smysl uvažovat i časovou parciální derivaci a vyjádřit ji pomocí konečných diferencí. Pro přehlednost značíme časové hladiny v diskrétní podobě horním indexem. Hodnotu funkce c v bodě (x_i, y_j, z_k) a v čase t_n značíme $c_{i,j,k}^n = c(x_i, y_j, z_k, t_n)$, její aproximaci $C_{i,j,k}^n$. Dopřednou časovou diferenci vyjádříme jako

$$\frac{\partial c(x_i, y_j, z_k, t_n)}{\partial t} \approx \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t}, \quad (5.11)$$

zpětná časová derivace pak vypadá následovně

$$\frac{\partial c(x_i, y_j, z_k, t_n)}{\partial t} \approx \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i,j,k}^{n-1}}{\Delta t}, \quad (5.12)$$

kde Δt vyjadřuje délku časového kroku (dobu mezi dvěma sousedními časovými okamžiky).

5.1.2 Diferenční metody pro řešení evolučních parabolických PDR

Rovnice difúze je PDR parabolického typu. Parabolické rovnice patří mezi evoluční. Evolučními rovnicemi rozumíme takové, které popisují nestacionární děje. S pomocí difúzní rovnice v 1D si na dalších řádcích vysvětlíme základní principy *explicitních* a *implicitních* diferenčních metod pro řešení parabolických PDR. Uvažujme tedy úlohu

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, t \in (0, T), x \in (0, 1), D \in \mathbb{R}^+, \quad (5.13)$$

kde D je difúzní koeficient, s počáteční podmínkou

$$c(x, 0) = c_0(x), x \in \langle 0, 1 \rangle \quad (5.14)$$

a okrajovými podmínkami

$$c(0, t) = g_0(t), c(1, t) = g_1(t), t \in (0, T). \quad (5.15)$$

Interval $(0, 1)$ prostorové proměnné x rozdělíme na I úseků o délce h , dostaneme tak $I + 1$ uzlů s indexy $i = 0, \dots, I$. Analogicky rozdělíme časový interval $(0, T)$ na $N + 1$ časových vrstev s indexy $n = 0, \dots, N$. Uvažujeme opět uzlové hodnoty C_i^n tentokrát v 1D. Rovnici (5.13) převedeme na diferenční tak, že časovou derivaci nahradíme dopřednou časovou diferencí (5.11) a druhou prostorovou derivaci nahradíme centrální diferencí druhého řádu (5.10). Získáme následující rovnost

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = D \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{h^2}, \quad (5.16)$$

kde $i = 1, \dots, I - 1$. Z výše uvedené rovnice (5.16) je možno snadno získat *explicitní* vztah pro hodnotu na nové časové vrstvě t_{n+1} :

$$C_i^{n+1} = \frac{D\Delta t}{h^2} C_{i-1}^n + \left(1 - \frac{2D\Delta t}{h^2}\right) C_i^n + \frac{D\Delta t}{h^2} C_{i+1}^n. \quad (5.17)$$

Obecně můžeme diferenční formuli explicitních metod zapsat ve tvaru

$$\mathbf{C}^{(n+1)} = \mathbb{H} \left(\mathbf{C}^{(n)} \right), \quad (5.18)$$

kde \mathbb{H} je operátor přechodu z n -té časové vrstvy na vrstvu $n + 1$.

U numerických metod je vždy obecně důležitá otázka jejich stability. Explicitní metoda vyjádřená formulí (5.17) je stabilní, pokud délku časového kroku omezíme vztahem

$$0 \leq \Delta t \leq \frac{h^2}{2D}. \quad (5.19)$$

Lze ukázat, že podmínka (5.19) je postačující podmínkou stability i pro obecnější úlohy. Podrobnější rozbor stability a dalších teoretických aspektů uvádí [35].

Poznámka 5.1 Uved'me si nyní jeden varovný příklad, který ukazuje, že diskretizaci nelze provést libovolně. Uvažujme následující rovnost

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{\Delta t} = D \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{h^2}. \quad (5.20)$$

Oproti (5.16) jsme pro aproximaci časové derivace místo dopředné difference použili centrální. Tím jsme dokonce zvýšili přesnost potenciálně odvozené metody. Ta však bude podle [35] na rozdíl od (5.17) nestabilní.

Implicitní metodu můžeme sestavit podobným způsobem jako explicitní s tím rozdílem, že druhou prostorovou derivaci budeme aproximovat na časové vrstvě t_{n+1} místo vrstvy t_n . Opět budeme uvažovat parabolickou PDR pro difúzi v 1D (5.13). Obdržíme následující rovnost

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = D \frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{h^2}. \quad (5.21)$$

Odsud můžeme opět vyjádřit vztah pro výpočet na nové časové vrstvě

$$-\frac{D\Delta t}{h^2}C_{i-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2D\Delta t}{h^2}\right)C_i^{n+1} - \frac{D\Delta t}{h^2}C_{i+1}^{n+1} = C_i^n, \quad (5.22)$$

pro $i = 1, \dots, I-1$, který je však, jak vidíme, implicitní. Navíc rovnic je o 2 méně než neznámých, takže potřebujeme přidat 2 okrajové podmínky

$$C_0^{n+1} = g_0(t_{n+1}), \quad C_I^{n+1} = g_1(t_{n+1}). \quad (5.23)$$

Poté můžeme soustavu pro neznámé hodnoty $C_1^{n+1}, \dots, C_{I-1}^{n+1}$ zapsat maticově jako

$$\begin{bmatrix} 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \cdots & \ddots & -r & 1+2r & -r \\ 0 & \cdots & 0 & -r & 1+2r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{n+1} \\ C_2^{n+1} \\ \vdots \\ C_{I-2}^{n+1} \\ C_{I-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1^n \\ C_2^n \\ \vdots \\ C_{I-2}^n \\ C_{I-1}^n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} rg_0(t_{n+1}) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ rg_1(t_{n+1}) \end{bmatrix}, \quad (5.24)$$

kde $r = \frac{D\Delta t}{h^2}$. Schématicky můžeme předpis (5.24) zapsat takto:

$$\mathbf{A}\mathbf{C}^{n+1} = \mathbf{C}^n + \mathbf{F}^{n+1}. \quad (5.25)$$

Na každé časové vrstvě tedy musíme řešit soustavu lineárních algebraických rovnic, což je jistě náročnější než přímý explicitní předpis. Proto lze explicitní metody mnohem jednodušeji algoritmizovat. Naproti tomu velká nevýhoda explicitních metod tkví v jejich podmíněné stabilitě (5.19), z čehož dále plyne omezení délky časového kroku, což ve výsledku velmi zpomaluje výpočet. Naproti tomu stabilita implicitních metod není ničím podmíněna, takže tyto metody umožňují volit libovolně dlouhé časové kroky a ani na velikost parametru r nejsou kladeny žádné požadavky.

5.1.3 Diferenční metody pro řešení evolučních hyperbolických PDR

Jako modelová rovnice pro seznámení s dalšími diferenčními metodami nám poslouží lineární hyperbolická PDR pro modelování konvekce skalární veličiny v 1D. Uvažujme tedy následující úlohu

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0, t \in (0, T), x \in \mathbb{R}, u \in \mathbb{R} \quad (5.26)$$

s počáteční podmínkou

$$c(x, 0) = c_0(x), x \in \mathbb{R}, \quad (5.27)$$

kde $c(x, t) \in C^2(\mathbb{R})$ je skalární funkce, jejíž hodnoty hledáme a u je (pro jednoduchost konstantní) hodnota rychlosti (známenko u určuje směr pohybu). Dále předpokládáme, že nosič $\text{supp } c_0 = \{x \in \mathbb{R} : c_0(x) \neq 0\}$ je omezený. Interval, na němž hledáme řešení, opět rozdělíme na stejně dlouhé subintervaly. To samé provedeme s intervalem časovým. Níže si uvedeme přehled metod používaných k řešení hyperbolických evolučních PDR, ze kterých budu dále vycházet při tvorbě vlastního modelu.

Základní postupy při odvození metod pro hyperbolické rovnice jsou totožné jako u rovnic parabolických, proto se jednotlivými metodami nebudeme zabývat do hloubky. Jejich podrobnější popis je opět možno najít v [35]. První z numerických metod pro řešení evolučních hyperbolických rovnic, se kterou se seznámíme, je *Lax-Friedrichsova* metoda. Prostorovou derivaci nahrazuje centrální diferencí

$$\frac{\partial c(x_i, t_n)}{x} \approx \frac{1}{2h} (C_{i+1}^n - C_{i-1}^n). \quad (5.28)$$

Podobným způsobem aproximujeme i hodnotu neznámé funkce v bodě x_i a v čase t_n jako

$$c(x_i, t_n) \approx \frac{1}{2} (C_{i-1}^n + C_{i+1}^n). \quad (5.29)$$

Aproximaci (5.29) následně využijeme při stanovení aproximace časové derivace neznámé funkce

$$\frac{\partial c(x_i, t_n)}{\partial t} \approx \frac{1}{\Delta t} (c(x_i, t_{n+1}) - c(x_i, t_n)) \approx \frac{1}{\Delta t} \left(C_i^{n+1} - \frac{1}{2} (C_{i-1}^n + C_{i+1}^n) \right). \quad (5.30)$$

Podobně jako u metod pro parabolické PDR dosadíme vztahy pro aproximace jednotlivých parciálních derivací (5.28) (5.30) do rovnice pro konvekci (5.26) a dostaneme diskrétní vztah

$$\frac{1}{\Delta t} \left(C_i^{n+1} - \frac{1}{2} (C_{i-1}^n + C_{i+1}^n) \right) + u \frac{1}{2h} (C_{i+1}^n - C_{i-1}^n) = 0. \quad (5.31)$$

Z něj jednoduchými úpravami získáme vztah pro hodnotu funkce na nové časové vrstvě

$$C_i^{n+1} = \frac{1}{2} (C_{i-1}^n + C_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2h} u (C_{i+1}^n - C_{i-1}^n). \quad (5.32)$$

Vztah (5.32) udává tvar Lax-Friedrichsovy metody pro lineární úlohu.

Dalšími diferenčními metodami pro řešení hyperbolických evolučních PDR jsou například *Lax-Wendroffova* metoda, která používá pro aproximaci více členů Taylorova rozvoje a *MacCormackova* dvoukroková metoda, která při přechodu z časové vrstvy t_n na vrstvu t_{n+1} využívá ještě pomocnou hodnotu mezi těmito vrstvami. Všechny výše uvedené metody lze využít pro soustavy lineárních i nelineárních PDR. Podrobnější rozbor stability a dalších teoretických aspektů je opět možno nalézt v [35].

5.2 Řešení Stokesovy rovnice

Stokesova rovnice (3.15) popisuje stacionární laminární proudění. Jejím řešením je vektorové pole rychlostí \mathbf{u} a skalární pole tlaků p uvnitř výpočetní oblasti Ω . Tuto rovnici doplňujeme o podmínku nestlačitelnosti v podobě rovnice kontinuity (3.7). Výsledná soustava PDR má tvar

$$\begin{cases} -\mu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \end{cases} \quad (5.33)$$

na oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, kde $\mathbf{u} \in C^2(\Omega)$ s okrajovými podmínkami

- $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = u_I, \mathbf{x} \in \Gamma_I$
- $\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x})}{\partial n} \in \Gamma_O$
- $p(\mathbf{x}) = 0 \in \Gamma_O$
- $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Gamma_W,$

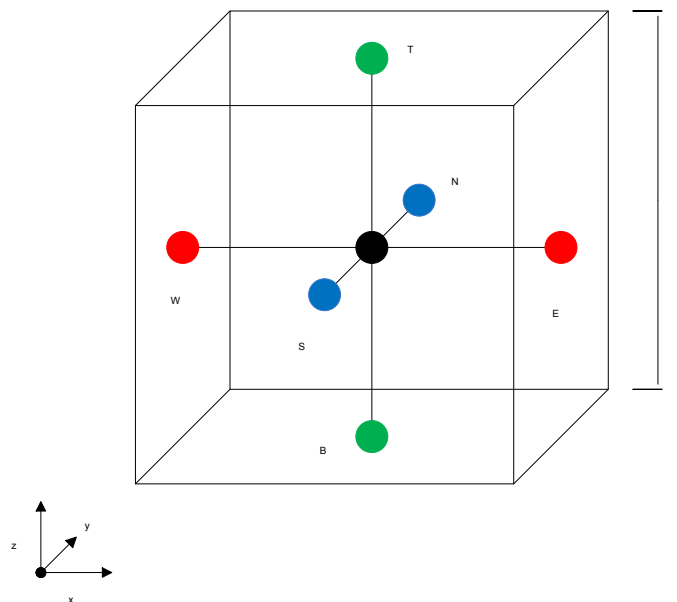
kde $\Gamma_I, \Gamma_O, \Gamma_W$ jsou části hranice popsané v kapitole 3.4 a platí pro ně

$$\Gamma_I \cup \Gamma_O \cup \Gamma_W = \partial\Omega,$$

$$\Gamma_I \cap \Gamma_O \cap \Gamma_W = \emptyset.$$

Pro řešení rovnic popisujících proudění je obecně důležité provést stabilní diskretizaci příslušné úlohy. Stabilní diskretizací rozumíme takovou, pro kterou je i daný numerický model potažmo metoda stabilní tzn. že malé změny ve vstupních datech se moc neprojeví na výstupu modelu. Proto se používá tzv. rozložená síť (anglicky *multigrid* nebo také *staggered grid*) kde jsou neznámé jednotlivých složek rychlostí a tlaků umístěny v různých uzlech sítě. Zjednodušeně řečeno je potřeba mít více uzlů s neznámou rychlostí než uzlů, ve kterých je neznámá pro tlak.

Pro vytvoření numerického modelu jsem si vybral stabilní diskretizaci popsanou Chenem v [37]. Zde navržený postup řeší diskretizaci Stokesových rovnic pouze ve 2D. Jeho základní principy jsem rozšířil a následně implementoval do 3D.



Obrázek 5.2: Buňka diskretizační sítě pro řešení Stokesovy rovnice

5.2.1 Diskretizace

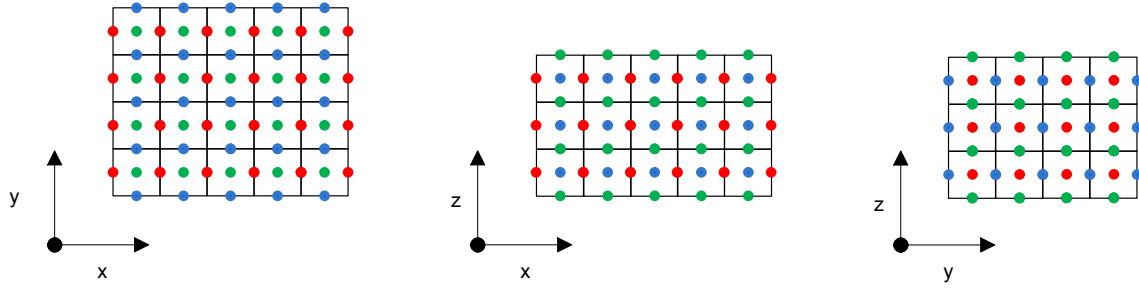
Uvažujme tedy soustavu lineárních PDR 5.33 včetně okrajových podmínek. Tuto soustavu diskretizujeme tak, že výpočetní oblast pokryjeme buňkami ve tvaru krychle znázorněné na obrázku 5.2.⁸ Stěny buňky si pro názornost označíme písmeny.⁹ Uprostřed každé stěny je vždy umístěná příslušná normálová složka rychlosti k dané stěně. Tzn. x -ová složka u na stěnách E a W, y -ová složka v na stěnách S a N, z -ová složka w pak uprostřed stěn T a B. Uprostřed celé buňky je pak lokalizována neznámá pro tlak uvnitř dané buňky. Neznámé indexujeme ve směru jednotlivých os, jak je naznačeno na obrázku 5.2. Pokud uvažujeme buňku i, j, k , tak uprostřed stěny W je umístěna neznámá $u_{i,j,k}$, na stěně E leží $u_{i+1,j,k}$. Obdobně na stěnách S a N leží rychlosti $v_{i,j,k}$ a $v_{i,j+1,k}$ a na stěnách B, N jsou analogicky umístěny z -ové složky $w_{i,j,k}$ a $w_{i,j,k+1}$. Uprostřed buňky je pak situována tlaková neznámá $p_{i,j,k}$.

Pro ilustraci řešení předpokládejme proudění popsané Stokesovými rovnicemi na oblasti ve tvaru kvádru, kterou pokryjeme $M \times N \times P$ buňkami. Konstanty M, N, P určují počty buněk ve směrech os x, y, z . Důležité je si uvědomit, že počty neznámých se z důvodů různého umístění budou pro jednotlivé složky lišit. Tlakových neznámých bude pro také $M \times N \times P$, jelikož každá buňka výpočetní sítě obsahuje právě jednu tlakovou neznámou.

Představu o počtu neznámých pro složky rychlosti u, v, w si snáze uděláme s pomocí obrázku 5.3, na kterém jsou znázorněny řezy sítě rovinami, které jsou určeny souřadni-

⁸Počet buněk v směrech jednotlivých os může být různý, tzn. že dohromady mohou tvořit kvádr.

⁹Z anglického east, west, north, south, top, bottom.



Obrázek 5.3: Řezy výpočetní sítě rovinami určenými pomocí souřadnicových os

covými osami. Rozměry sítě jsou $[M, N, P] = [5, 4, 3]$. Z obrázku 5.3 vidíme, že jednotlivé složky rychlosti mají ve „svém“ směru vždy o jednu neznámou více, než je počet buněk v daném směru, v ostatních směrech jsou pak počty neznámých totožné s počtem buněk. Konkrétně např. x -ová složka rychlosti u má ve směru osy x $M + 1$ neznámých ve směrech y a z pak N a P neznámých, celkem tedy $(M + 1) \times N \times P$ neznámých, což je více, než kolik máme buněk potažmo rovnic pro složku u .

Buňky potažmo neznámé indexujeme od 1 do M, N, P .¹⁰ Buňka s indexem $[1, 1, 1]$ leží v rohu, kde se setkávají stěny W, B, S . Z důvodů pozdější aplikace terénu indexujeme výpočetní síť nejprve ve směru osy z , pak ve směru osy x a nakonec ve směru osy y . Pokud uvažujeme Dirichletovy okrajové podmínky pro úlohu (5.33), získáme následující vektory neznámých

$$\begin{aligned}
 u^T = & (u_{2,1,1}, u_{2,1,2}, \dots, u_{2,1,P}), (u_{3,1,1}, u_{3,1,2}, \dots, u_{3,1,P}), \dots, (u_{M+1,1,1}, \dots, u_{M+1,1,P}), \\
 & (u_{2,2,1}, u_{2,2,2}, \dots, u_{2,2,P}), (u_{3,2,1}, u_{3,2,2}, \dots, u_{3,2,P}), \dots, (u_{M+1,2,1}, \dots, u_{M+1,2,P}), \\
 & \dots \\
 & (u_{2,N,1}, u_{2,N,2}, \dots, u_{2,N,P}), (u_{3,N,1}, \dots, u_{3,N,P}), \dots, (u_{M+1,N,1}, \dots, u_{M+1,N,P})
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

o rozměrech $(1, M \cdot N \cdot P)$,

$$\begin{aligned}
 v^T = & (v_{1,2,1}, v_{1,2,2}, \dots, v_{1,2,P}), (v_{2,2,1}, v_{2,2,2}, \dots, v_{2,2,P}), \dots, (v_{M,2,1}, v_{M,2,2}, \dots, v_{M,2,P}), \\
 & (v_{1,3,1}, v_{1,3,2}, \dots, v_{1,3,P}), (v_{2,3,1}, v_{2,3,2}, \dots, v_{2,3,P}), \dots, (v_{M,3,1}, v_{M,3,2}, \dots, v_{M,3,P}), \\
 & \dots \\
 & (v_{1,N,1}, v_{1,N,2}, \dots, v_{1,N,P}), (v_{2,N,1}, v_{2,N,2}, \dots, v_{2,N,P}), \dots, (v_{M,N,1}, v_{M,N,2}, \dots, v_{M,N,P})
 \end{aligned} \tag{5.35}$$

¹⁰ $i \in \{1, 2, \dots, M\}; j \in \{1, 2, \dots, N\}; k \in \{1, 2, \dots, P\}$

o rozměrech $(1, M \cdot (N - 1) \cdot P)$,

$$\begin{aligned}
 w^T = & (w_{1,1,2}, w_{1,1,3}, \dots, w_{1,1,P}), (w_{2,1,2}, w_{2,1,3}, \dots, w_{2,1,P}), \dots, (w_{M,1,2}, w_{M,1,3}, \dots, w_{M,1,P}), \\
 & (w_{1,2,2}, w_{1,2,3}, \dots, w_{1,2,P}), (w_{2,2,2}, w_{2,2,3}, \dots, w_{2,2,P}), \dots, (w_{M,2,2}, w_{M,2,3}, \dots, w_{M,2,P}), \\
 & \dots \\
 & (w_{1,N,2}, w_{1,N,3}, \dots, w_{1,N,P}), (w_{2,N,2}, w_{2,N,3}, \dots, w_{2,N,P}), \dots, (w_{M,N,2}, \dots, w_{M,N,P})
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

o rozměrech $(1, M \cdot N \cdot (P - 1))$ a

$$\begin{aligned}
 p^T = & (p_{1,1,1}, p_{1,1,2}, \dots, p_{1,1,P}), (p_{2,1,1}, p_{2,1,2}, \dots, p_{2,1,P}), \dots, (p_{M,1,1}, p_{M,1,2}, \dots, p_{M,1,P}), \\
 & (p_{1,2,1}, p_{1,2,2}, \dots, p_{1,2,P}), (p_{2,2,1}, p_{2,2,2}, \dots, p_{2,2,P}), \dots, (p_{M,2,1}, p_{M,2,2}, \dots, p_{M,2,P}), \\
 & \dots \\
 & (p_{1,N,1}, p_{1,N,2}, \dots, p_{1,N,P}), (p_{2,N,1}, p_{2,N,2}, \dots, p_{2,N,P}), \dots, (p_{M,N,1}, p_{M,N,2}, \dots, p_{M,N,P})
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

o rozměrech $(1, M \cdot N \cdot P)$.

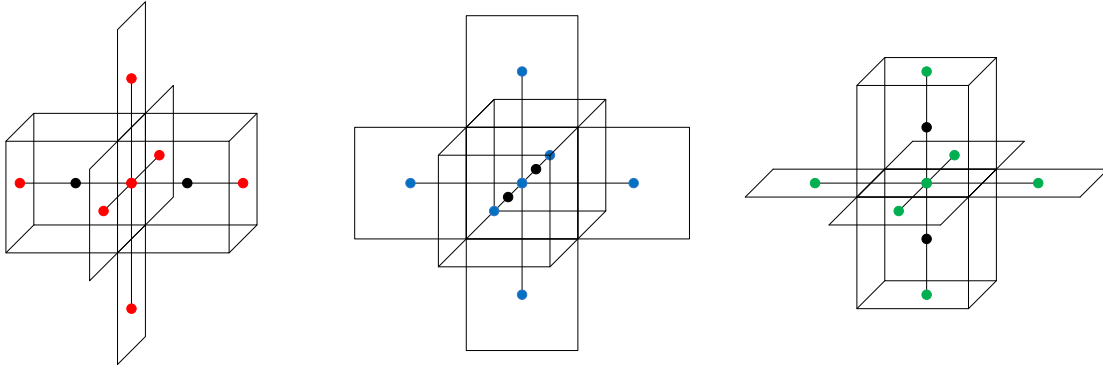
5.2.2 Sestavení numerického modelu

Uvažujme dále diskrétní aproximaci okrajové úlohy (5.33) popsanou soustavou rovnic (5.38) - (5.41) uvnitř oblasti Ω tvaru kvádru o rozměrech $[M.h, N.h, P.h]$. Stěna $x = 0$ odpovídá hranici Γ_I , stěna $x = M.h$ odpovídá hranici Γ_O . Ostatní stěny odpovídají hranici Γ_W . Tuto oblast pokryjeme krychlovými buňkami o délce hrany h z obrázku 5.2. Použitím centrálních diferencí pro všechny rychlosti $u_{i,j,k}$, $v_{i,j,k}$, $w_{i,j,k}$ a zpětných diferencí pro všechny tlaky $p_{i,j,k}$ získáme následující diskrétní rovnice:

$$\begin{aligned}
 -\mu \left(\frac{u_{i-1,j,k} + u_{i,j-1,k} + u_{i,j,k-1} - 6u_{i,j,k} + u_{i+1,j,k} + u_{i,j+1,k} + u_{i,j,k+1}}{h^2} \right) + \\
 + \frac{p_{i,j,k} - p_{i-1,j,k}}{h} = f_{i,j,k}^1
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

$$\begin{aligned}
 -\mu \left(\frac{v_{i-1,j,k} + v_{i,j-1,k} + v_{i,j,k-1} - 6v_{i,j,k} + v_{i+1,j,k} + v_{i,j+1,k} + v_{i,j,k+1}}{h^2} \right) + \\
 + \frac{p_{i,j,k} - p_{i,j-1,k}}{h} = f_{i,j,k}^2
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

$$\begin{aligned}
 -\mu \left(\frac{w_{i-1,j,k} + w_{i,j-1,k} + w_{i,j,k-1} - 6w_{i,j,k} + w_{i+1,j,k} + w_{i,j+1,k} + w_{i,j,k+1}}{h^2} \right) + \\
 + \frac{p_{i,j,k} - p_{i,j,k-1}}{h} = f_{i,j,k}^3.
 \end{aligned} \tag{5.40}$$



Obrázek 5.4: Schémata využitá pro aproximaci Stokesových rovnic pomocí konečných diferencí

Schématy pro tvorbu jednotlivých rovnic jsou znázorněna na obrázku 5.4. Rovnici kontinuity diskretizujeme pomocí dopředných diferencí takto

$$\frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{h} + \frac{v_{i,j+1,k} - v_{i,j,k}}{h} + \frac{w_{i,j,k+1} - w_{i,j,k}}{h} = 0. \quad (5.41)$$

Úlohu můžeme maticově zapsat následovně

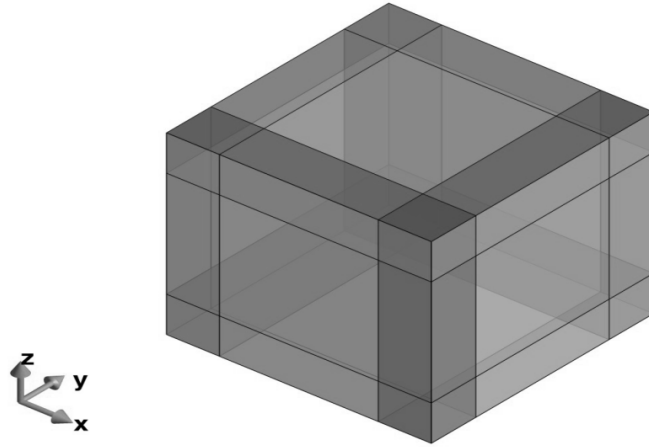
$$A\mathbf{u} = 0 + Q, \quad (5.42)$$

kde Q je vektor okrajových podmínek (5.70) blíže popsany na konci této kapitoly. Řádky bloků matice A odpovídají jednotlivým rovnicím soustavy (5.38) - (5.41), vektor \mathbf{u} je tvořen vektory popsany v podkapitole 5.2.1

$$A = \begin{bmatrix} T_1 & O & O & B_1 \\ O & T_2 & O & B_2 \\ O & O & T_3 & B_3 \\ \tilde{B}_1 & \tilde{B}_2 & \tilde{B}_3 & O \end{bmatrix}; \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ p \end{bmatrix}. \quad (5.43)$$

Před tím, než podrobně popíšeme jednotlivé bloky matice A , je nutné ukázat, jak se v našem schématu aplikují okrajové podmínky, jelikož na rozdíl např. od MKP, u MKD ovlivňují okrajové podmínky i samotnou matici soustavy. Obrázek 5.5 z prezentace [36] znázorňuje uzly přímo ovlivněné okrajovými podmínkami, jsou to uzly ležící v rozích a na hranách nebo stěnách výpočetní oblasti. Vidíme, že na rohové uzly se aplikují 3 okrajové podmínky, na hranové uzly se aplikují 2 okrajové podmínky a pro uzly ležící na stěnách počítáme s 1 okrajovou podmínkou.

Pro snadnější popis okrajových podmínek označíme jednotlivé stěny oblasti stejným způsobem jako stěny buňky na obrázku 5.2. Na hranici Γ_W předepíšeme okrajovou podmínku pevné nepohybující se stěny. Na hranici Γ_I předepíšeme Dirichletovu okrajovou



Obrázek 5.5: Ilustrace uzlů sítě přímo ovlivněných okrajovými podmínkami

podmínku pro rychlosti ve směru osy x a pro ostatní rychlosti pak předepíšeme homogenní Dirichletovu okrajovou podmínku. Na hranici Γ_O pak uvažujeme homogenní Neumannovu okrajovou podmínku pro složku u a homogenní Dirichletovu podmínku pro složky v, w i pro tlak. Funkci f předpokládáme také nulovou.

Nyní si ukážeme způsob, jakým tyto okrajové podmínky aplikujeme. V případě, že hodnota některé neznámé leží přímo na hranici výpočetní oblasti, předepíšeme přímo okrajovou podmínku pro daný uzel. Konkrétně předpis pro Dirichletovu okrajovou podmínku na hranici Γ_I vypadá následovně

$$u_{1,j,k} = u_W; j = 1, \dots, N; k = 1, \dots, P. \quad (5.44)$$

Tuto hodnotu pak přičteme k pravé straně soustavy (5.42) jako součást vektoru Q (5.70).

Jako druhý příklad aplikace okrajové podmínky ležící přímo na hranici ukážu homogenní Neumannovu podmínku pro neznámou u na outletu, s níž je spojena i homogenní Dirichletova podmínka pro tlak. Uvažujeme celou stěnu Γ_O , takže pro indexy j, k platí $j = 1, \dots, N$ a $k = 1, \dots, P$. Schéma pro výpočet vidíme na obrázku 5.6. Pro okrajové podmínky platí:

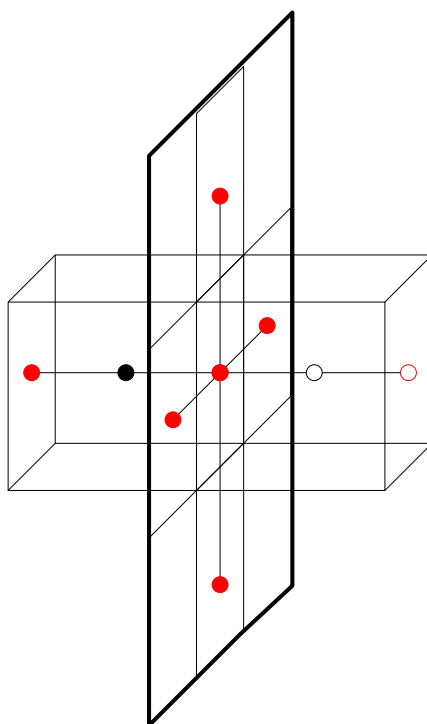
$$\frac{p_{M,j,k} + p_{M+1,j,k}}{2} = 0, \quad \frac{u_{M+2,j,k} - u_{M,j,k}}{2h} = 0, \quad (5.45)$$

odkud po úpravách dostaneme vztahy

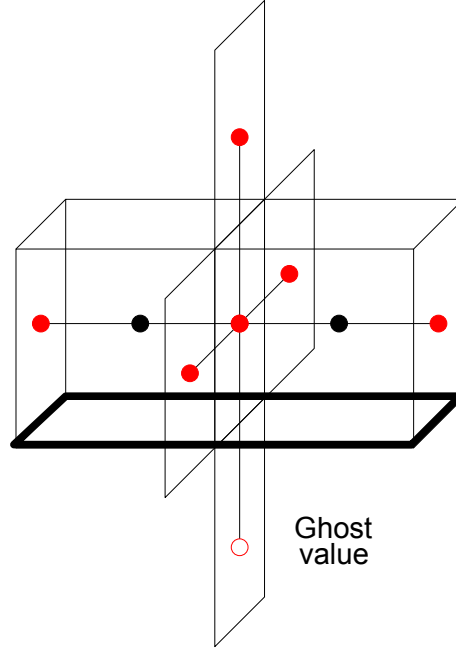
$$p_{M,j,k} = -p_{M+1,j,k}, \quad u_{M+2,j,k} = u_{M,j,k}, \quad (5.46)$$

které dosadíme do rovnice (5.47) pro $u_{M+1,j,k}$

$$\begin{aligned} -\mu \left(\frac{u_{M,j,k} + u_{M+1,j-1,k} + u_{M+1,j,k-1} - 6u_{M+1,j,k} + u_{M+1,j+1,k} + u_{M+1,j,k+1} + u_{M+2,j,k}}{h^2} \right) + \\ + \frac{p_{M+1,j,k} - p_{M,j,k}}{h} = 0. \end{aligned} \quad (5.47)$$



Obrázek 5.6: Aplikace okrajové podmínky na outletu



Obrázek 5.7: Aplikace okrajové podmínky pro neznámou u na spodní stěně

a získáme následující rovnici

$$-\mu \left(\frac{2\mathbf{u}_{\mathbf{M},\mathbf{j},\mathbf{k}} + u_{M+1,j-1,k} + u_{M+1,j,k-1} - 6u_{M+1,j,k} + u_{M+1,j+1,k} + u_{M+1,j,k+1}}{h^2} \right) + \frac{-2\mathbf{p}_{\mathbf{M},\mathbf{j},\mathbf{k}}}{h} = 0. \quad (5.48)$$

Stojí za povšimnutí, že pro homogenní Dirichletovu okrajovou podmínku pro tlak jsme použili trochu jiný koncept než v předchozím příkladě pro rychlost u , jelikož její hodnota neleží přímo na hranici.

Pokud hodnotu příslušné neznámé na hranici nemáme, zavedeme tzv. „ghost value“ pro příslušnou neznámou v místě, kde by se běžně nacházela, pokud by tam nebyla hranice. Pro lepší pochopení si použití ghost value ukážeme na příkladu. Mějme situaci, kdy počítáme hodnotu neznámé u blízko spodní stěny oblasti (viz obrázek 5.7). Ghost value si v tomto případě označíme $u_{i,j,0}$. Pro hodnotu Dirichletovy okrajové podmínky na spodní stěně $g_D(x, y, 0)$ pak platí $\frac{u_{i,j,1} + u_{i,j,0}}{2} = g_D(x, y, 0)$. V našem případě $g_D(x, y, 0) = 0$, takže po úpravě získáme rovnost $u_{i,j,1} = -u_{i,j,0}$. Tu dále využijeme v rovnici (5.49) pro uzel $u_{i,j,1}$:

$$-\mu \left(\frac{u_{i-1,j,1} + u_{i,j-1,1} + \mathbf{u}_{\mathbf{i},\mathbf{j},0} - 6u_{i,j,1} + u_{i+1,j,1} + u_{i,j+1,1} + u_{i,j,2}}{h^2} \right) + \frac{p_{i,j,1} - p_{i-1,j,1}}{h} = 0, \quad (5.49)$$

kteřá se po aplikování okrajové podmínky změní na

$$-\mu \left(\frac{u_{i-1,j,1} + u_{i,j-1,1} - 7u_{i,j,1} + u_{i+1,j,1} + u_{i,j+1,1} + u_{i,j,2}}{h^2} \right) + \frac{p_{i,j,1} - p_{i-1,j,1}}{h} = 0. \quad (5.50)$$

Dále si ukážeme, jak vypadají jednotlivé bloky matice A . Pro přehlednější zápis první 3 „řádky“ bloků matice A ze zápisu (5.43) přenásobíme výrazem $\frac{h^2}{\mu}$. Čtvercová matice T_1 reprezentuje diskretizovaný Laplaceův operátor proměnné u z rovnice (5.38) včetně aplikovaných okrajových podmínek a vypadá takto

$$T_1 = \overbrace{\begin{bmatrix} D1_{T_1} & -I_{M \times P} & & \\ -I_{M \times P} & D2_{T_1} & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & D2_{T_1} & -I_{M \times P} \\ & & & -I_{M \times P} & D1_{T_1} \end{bmatrix}}^{M \times N \times P}. \quad (5.51)$$

Pro snadnější znázornění bloku T_1 zavádíme další podbloky

$$D2_{T_1} = \overbrace{\begin{bmatrix} D_{767} & -I_P & & \\ -I_P & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_P \\ & & -2I_P & D_{767} \end{bmatrix}}^{M \times P}, \quad D1_{T_1} = D2_{T_1} + I_{M \times P}, \quad (5.52)$$

$$D_{767} = \overbrace{\begin{bmatrix} 7 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 6 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 6 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 7 \end{bmatrix}}^P. \quad (5.53)$$

Pro jednoduchost uvažujme notaci, že I_x reprezentuje čtvercovou jednotkovou matici o rozměrech x , tedy například $I_{P \times M}$ je čtvercová jednotková matice o rozměrech $P \times M$. Podobně budeme postupovat i v případě bloku T_2 , kde využijeme stejnou matici D_{767} (viz (5.53)) jako pro blok T_1 . Navíc zavedeme matici $D_{878} = D_{767} + I_P$. Bloková čtvercová

matice T_2 vypadá takto

$$T_2 = \overbrace{\begin{bmatrix} D1_{T_2} & -I_{M \times P} & & \\ -I_{M \times P} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_{M \times P} \\ & & -I_{M \times P} & D1_{T_2} \end{bmatrix}}^{M \times (N-1) \times P}. \quad (5.54)$$

a reprezentuje diskretizovaný Laplaceův operátor proměnné v z rovnice (5.39) včetně aplikovaných okrajových podmínek. Jak vidíme diagonála se skládá z bloků

$$D1_{T_2} = \overbrace{\begin{bmatrix} D_{878} & -I_P & & \\ -I_P & D_{767} & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & D_{767} & -I_P \\ & & & -I_P & D_{878} \end{bmatrix}}^{M \times P}. \quad (5.55)$$

Matice T_3 reprezentuje diskretizovaný Laplaceův operátor proměnné w z rovnice (5.40) včetně aplikovaných okrajových podmínek a vypadá takto

$$T_3 = \overbrace{\begin{bmatrix} D1_{T_3} & -I_{M \times (P-1)} & & \\ -I_{M \times (P-1)} & D2_{T_3} & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & D2_{T_3} & -I_{M \times (P-1)} \\ & & & -I_{M \times (P-1)} & D1_{T_3} \end{bmatrix}}^{M \times N \times (P-1)}. \quad (5.56)$$

Při konstrukci podbloků matice T_3 postupujeme analogicky jako v případě matic T_1 a T_2 .

$$D2_{T_3} = \overbrace{\begin{bmatrix} D_7 & -I_{P-1} & & \\ -I_{P-1} & D_6 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & D_6 & -I_{P-1} \\ & & & -I_{P-1} & D_7 \end{bmatrix}}^{M \times (P-1)}, D1_{T_3} = D2_{T_3} + I_{M \times (P-1)}. \quad (5.57)$$

$$D_6 = \overbrace{\begin{bmatrix} 6 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 6 \end{bmatrix}}^{P-1}, D_7 = D_6 + I_{P-1}. \quad (5.58)$$

Dále se zaměříme na bloky B_1, B_2, B_3 matice A reprezentující tlakové neznámé. Matice B_1

$$B_1 = \frac{h}{\mu} \overbrace{\begin{bmatrix} D_{B_1} & & \\ & \ddots & \\ & & D_{B_1} \end{bmatrix}}^{M \times N \times P}. \quad (5.59)$$

se skládá z bloků

$$D_{B_1} = \overbrace{\begin{bmatrix} -I_P & I_P & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -I_P & I_P \\ & & & -2I_P \end{bmatrix}}^{M \times P} \quad (5.60)$$

V posledním bloku na diagonále matice D_{B_1} se projeví aplikace homogenní Dirichletovy okrajové podmínky pro tlak na outletu.

Matice B_2 je obdélníková o rozměrech $[M \times (N-1) \times P, M \times N \times P]$, jelikož reprezentuje tlakové neznámé, kterých je $M \times N \times P$, v rovnicích „pro“ y -ové složky rychlosti v , kterých je $[M \times (N-1) \times P]$

$$B_2 = \frac{h}{\mu} \overbrace{\begin{bmatrix} -I_{M \times P} & I_{M \times P} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -I_{M \times P} & I_{M \times P} \end{bmatrix}}^{M \times N \times P}. \quad (5.61)$$

Matice B_3

$$B_3 = \frac{h}{\mu} \overbrace{\begin{bmatrix} D_{B_3} & & \\ & \ddots & \\ & & D_{B_3} \end{bmatrix}}^{M \times N \times P}. \quad (5.62)$$

se skládá z $M \times N$ obdélníkových bloků D_{B_3} o rozměrech $[P-1, P]$ umístěných na hlavní diagonále. Bloky D_{B_3} jsou obdélníkové ze stejného důvodu jako u matice B_2 , tedy proto,

že v z -ovém směru máme vždy $P - 1$ neznámých (i rovnic pro) z -ovou složku rychlosti w , ale tlakových neznámých je v tomto směru P .

$$D_{B_3} = \overbrace{\begin{bmatrix} -1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 1 \end{bmatrix}}^P \quad (5.63)$$

Poslední 3 bloky $\tilde{B}_1, \tilde{B}_2, \tilde{B}_3$ matice A reprezentují rovnici kontinuity (5.41) pro přehlednost vynásobenou konstantou h .

$$\tilde{B}_1 = \overbrace{\begin{bmatrix} D_{\tilde{B}_1} & & \\ & \ddots & \\ & & D_{\tilde{B}_1} \end{bmatrix}}^{M \times N \times P}. \quad (5.64)$$

představuje první člen zmíněné rovnice kontinuity a skládá se z N bloků

$$D_{\tilde{B}_1} = \overbrace{\begin{bmatrix} I_P & & & \\ -I_P & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -I_P & I_P \end{bmatrix}}^{M \times P} \quad (5.65)$$

umístěných na diagonále.

Druhý člen rovnice kontinuity (5.41) je reprezentován maticí \tilde{B}_2 , která má tvar obdélníku s rozměry $[M \times N \times P, M \times (N - 1) \times P]$, protože neznámých proměnné v je $M \times (N - 1) \times P$, ale buněk celkem $M \times N \times P$.

$$\tilde{B}_2 = \overbrace{\begin{bmatrix} I_{M \times P} & & \\ -I_{M \times P} & \ddots & \\ & \ddots & I_{M \times P} \\ & & -I_{M \times P} \end{bmatrix}}^{M \times (N-1) \times P}. \quad (5.66)$$

Matice \tilde{B}_3 reprezentující poslední člen rovnice kontinuity (5.41)

$$\tilde{B}_3 = \overbrace{\begin{bmatrix} D_{\tilde{B}_3} & & \\ & \ddots & \\ & & D_{\tilde{B}_3} \end{bmatrix}}^{M \times N \times (P-1)}. \quad (5.67)$$

se skládá z $M \times N$ obdélníkových matic $D_{\tilde{B}_3}$ o rozměrech $[P, P - 1]$, které vypadají takto

$$D_{\tilde{B}_3} = \begin{bmatrix} \overbrace{1}^{P-1} & & & \\ -1 & \ddots & & \\ & \ddots & 1 & \\ & & & -1 \end{bmatrix}. \quad (5.68)$$

Pro zkompletování soustavy (5.42) zbývá k pravé straně přičíst na příslušná místa hodnoty rychlostí z hranice výpočetní oblasti, abychom do modelu aplikovali okrajové podmínky. Kromě proměnné u na inletu máme na všech hranicích pro složky rychlosti u, v, w předepsanou homogenní Dirichletovu okrajovou podmínku. Takže jediné hodnoty, které budeme přičítat k pravé straně budou $u_{1,j,k}$, a to vždy k rovnicím pro výpočet uzlu $u_{2,j,k}$ (což jsou neznámé hodnoty proměnné u které leží nejbližší inletu) a k rovnici kontinuity. Za pomoci vektoru Q_1 vytvoříme výsledný vektor Q , který přičteme k pravé straně soustavy rovnic (5.42). Nulový vektor \mathbf{o} má rozměry $[M \times (N - 1) \times P + M \times N \times (P - 1), 1]$.

$$\begin{aligned} Q_1^T = & (u_{1,1,1}, u_{1,1,2}, \dots, u_{1,1,P}), \overbrace{0, \dots, 0}^{M \times (P-1)}, \\ & (u_{1,2,1}, u_{1,2,2}, \dots, u_{1,2,P}), \overbrace{0, \dots, 0}^{M \times (P-1)}, \\ & \dots \\ & (u_{1,N,1}, u_{1,N,2}, \dots, u_{1,N,P}), \overbrace{0, \dots, 0}^{M \times (P-1)}. \end{aligned} \quad (5.69)$$

$$Q = \begin{bmatrix} Q_1 \\ \mathbf{o} \\ Q_1 \end{bmatrix}. \quad (5.70)$$

Nyní máme soustavu kompletní, jejím vyřešením získáme hodnoty neznámých rychlostí u, v, w na stěnách a tlaků p uvnitř všech buněk. Pro další výpočty zprůměrujeme v každé buňce hodnoty rychlostí z protějších stěn, jelikož potřebujeme hodnotu rychlosti uprostřed buňky nikoliv na jejích stěnách.

5.3 Řešení konvekčně-difúzní rovnice

Jak víme z kapitoly 4, konvekčně-difúzní rovnice popisuje dva svým charakterem poměrně odlišné fyzikální děje. Následující kapitola popisuje, jak tuto rovnici numericky vyřešit. Uvažujme tedy okrajovou úlohu popsanou rovnicí

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = D \Delta c + R, \quad (5.71)$$

za předpokladu konstantního difúzního koeficientu D a nestlačitelné tekutiny, kde jednotlivé členy jsou popsány v kapitole 4. Úlohu řešíme na stejné oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ jako v případě numerického modelu pro $t \in \langle 0, T \rangle$ a $c \in C^2(\Omega)$ s homogenními Dirichletovými okrajovými podmínkami na celé hranici $\partial\Omega$

- $c(\mathbf{x}, t) = 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega, t \in \langle 0, T \rangle$

a nulovou počáteční podmínkou uvnitř celé oblasti Ω .

- $c(\mathbf{x}, 0) = 0, \mathbf{x} \in \Omega$.

5.3.1 Diskretizace

Uvažujme rovnici (4.7). Výpočetní síť využíváme totožnou jako v kapitole 5.2 s tím, že neznámé hodnoty koncentrací znečištění umístíme doprostřed buněk stejně jako tlakové neznámé v případě Stokesových rovnic. Vektor neznámých koncentrací indexujeme stejně jako vektor neznámých tlaků pro Stokesovy rovnice

$$\begin{aligned} C^T = & (C_{1,1,1}, C_{1,1,2}, \dots, C_{1,1,P}), (C_{2,1,1}, C_{2,1,2}, \dots, C_{2,1,P}), \dots, (C_{M,1,1}, C_{M,1,2}, \dots, C_{M,1,P}), \\ & (C_{1,2,1}, C_{1,2,2}, \dots, C_{1,2,P}), (C_{2,2,1}, C_{2,2,2}, \dots, C_{2,2,P}), \dots, (C_{M,2,1}, C_{M,2,2}, \dots, C_{M,2,P}), \\ & \dots \\ & (C_{1,N,1}, C_{1,N,2}, \dots, C_{1,N,P}), (C_{2,N,1}, C_{2,N,2}, \dots, C_{2,N,P}), \dots, (C_{M,N,1}, \dots, C_{M,N,P}). \end{aligned}$$

Časovou derivaci diskretizujeme pomocí dopředné difference, prostorové derivace pak pomocí centrálních diferencí. Dle [35] tato diskretizace splňuje podmínky stability. Získáme následující tvar

$$\begin{aligned} & \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \\ & + \left(u_{i,j,k} \frac{C_{i+1,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n}{2h} + v_{i,j,k} \frac{C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{2h} + w_{i,j,k} \frac{C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k-1}^n}{2h} \right) = \\ & = D \left(\frac{C_{i,j-1,k}^n + C_{i-1,j,k}^n + C_{i,j,k-1}^n - 6C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k+1}^n + C_{i+1,j,k}^n + C_{i,j,k+1}^n}{h^2} \right) + R_{i,j,k}. \end{aligned} \tag{5.72}$$

5.3.2 Sestavení fyzikálně-chemického modelu

Z rovnice (5.72) vyjádříme hodnotu koncentrace na následující časové vrstvě, čímž získáme explicitní vztah pro výpočet této hodnoty

$$\begin{aligned}
 C_{i,j,k}^{n+1} = & \left(1 - \frac{6\Delta t D}{h^2}\right) C_{i,j,k}^n + \Delta t R_{i,j,k} + \\
 & + \frac{\Delta t}{h} \left[\left(\frac{D}{h} + \frac{v_{i,j,k}}{2}\right) C_{i,j-1,k}^n + \left(\frac{D}{h} + \frac{u_{i,j,k}}{2}\right) C_{i-1,j,k}^n + \left(\frac{D}{h} + \frac{w_{i,j,k}}{2}\right) C_{i,j,k-1}^n \right] + \\
 & + \frac{\Delta t}{h} \left[\left(\frac{D}{h} - \frac{w_{i,j,k}}{2}\right) C_{i,j,k+1}^n + \left(\frac{D}{h} - \frac{u_{i,j,k}}{2}\right) C_{i+1,j,k}^n + \left(\frac{D}{h} - \frac{v_{i,j,k}}{2}\right) C_{i,j+1,k}^n \right].
 \end{aligned} \quad (5.73)$$

Hodnoty rychlostí u, v, w získané řešením Stokesovy rovnice nebo obecněji Navier-Stokesovy rovnice jsou vstupní parametry konvekčně-difúzní rovnice. Explicitní schéma přepíšeme v maticové podobě

$$\mathbf{C}^{n+1} = L\mathbf{C}^n + \Delta t R, \quad (5.74)$$

kde vektory \mathbf{C}^{n+1} a \mathbf{C}^n obsahují hodnoty koncentrací ve všech buňkách výpočetní sítě na příslušných časových vrstvách. Předpokládáme homogenní Dirichletovy okrajové podmínky pro koncentraci C

$$C_{i,j,k}^n = 0$$

na všech stěnách. Dále uvažujeme nulovou počáteční koncentraci uvnitř výpočetní oblasti

$$C_{i,j,k}^0 = 0.$$

Matici L složíme z bloků $D1_L$ a $D2_L$.

$$L = \overbrace{\begin{bmatrix} D2_L & \frac{D}{h} - \frac{v_{i,j,k}}{2} & & \\ \frac{D}{h} + \frac{v_{i,j,k}}{2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \frac{D}{h} - \frac{v_{i,j,k}}{2} \\ & & \frac{D}{h} + \frac{v_{i,j,k}}{2} & L \end{bmatrix}}^{M \times P \times N} \quad (5.75)$$

$$D2_L = \overbrace{\begin{bmatrix} D1_L & \frac{D}{h} - \frac{u_{i,j,k}}{2} & & \\ \frac{D}{h} + \frac{u_{i,j,k}}{2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \frac{D}{h} - \frac{u_{i,j,k}}{2} \\ & & \frac{D}{h} + \frac{u_{i,j,k}}{2} & D1_L \end{bmatrix}}^{M \times P} \quad (5.76)$$

$$D1_L = \overbrace{\begin{bmatrix} \frac{h}{\Delta t} - \frac{6D}{h} & \frac{D}{h} - \frac{w_{i,j,k}}{2} & & \\ \frac{D}{h} + \frac{w_{i,j,k}}{2} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \frac{D}{h} - \frac{w_{i,j,k}}{2} \\ & & \frac{D}{h} + \frac{w_{i,j,k}}{2} & \frac{h}{\Delta t} - \frac{6D}{h} \end{bmatrix}}^P \quad (5.77)$$

5.4 Aplikace terénu

Na závěr této kapitoly popíši způsob, jakým mnou implementované modely zpracovávají terén. Principiálně se postup při aplikaci terénu do obou modelů neliší. V případě numerického modelu proudění tekutin je však aplikace a následná implementace poněkud náročnější než v případě fyzikálně-chemického modelu šíření znečišťující látky.

Oba modely jsem implementoval v jazyce MATLAB[®]. Terén jsem získal ve formátu TIFF, který se běžně používá pro reprezentaci geografických dat. MATLAB[®] tento formát načte jako matici nadmořských výšek, což pro zmíněné modely plně postačuje. Pro potřeby model nejprve vytvoříme výpočetní síť kopírující příslušný terén (tj. síť bude mít na délku a na šířku stejný počet buněk jako načtená matice, počet buněk na výšku zvolíme podle potřeby). Buňky, které budou ležet pod úrovní terénu z výpočetní sítě nejprve vyjmeme a po provedení výpočtu je kvůli vykreslení výsledků do sítě zpět vrátíme.

Potřebujeme tedy zjistit, kolik buněk je potřeba v daných sloupcích výpočetní sítě vyjmout. To provedeme tak, že od matice s nadmořskými výškami odečteme nejmenší hodnotu v této matici (tím obrazně posuneme celý terén dolů na hladinu $z = 0$). Dále vydělíme po složkách takto upravenou matici délkou hrany krychlové buňky a zaokrouhlíme dolů na nejbližší celé číslo. Tím získáme matici, jejíž prvky obsahují počty buněk, které je třeba na příslušných souřadnicích vyjmout. Označme si ji V .

Fyzikálně-chemický model šíření znečištění

U fyzikálně-chemického modelu, který řeší konvekčně-difúzní rovnici, jak je uvedeno v kapitole 5.3, projdeme postupně celou matici V a odebereme řádky i sloupce z matice L (5.75) odpovídající vyjmutým buňkám. Dále odebereme i příslušné prvky vektoru neznámých C . Tím, že jsou neznámé indexovány ve výpočetní síti „po sloupcích“, odebíráme vždy souvislé úseky jak v matici L tak ve vektoru C , což mírně usnadní přehlednost a zrychlí celý postup. Jelikož máme na okrajích oblasti předepsanou homogenní Dirichletovu podmínku, tak nemusíme dělat žádné další úpravy a s takto upravenou maticí L

a vektorem neznámých C provedeme výpočet. Následně do vektoru C přidáme pro potřeby vykreslení výsledků nuly na místa dříve odebraných prvků.

Numerický model proudění

V případě numerického modelu proudění (který řeší Stokesovy rovnice viz kapitola 5.2) postupujeme podobně. Rozdíl je v tom, že zde máme s každou buňkou svázané čtyři neznámé namísto jedné u fyzikálně-chemického modelu. Navíc neznámé rychlostí u, v, w jsou umístěny na stěnách buněk, takže 1 neznámá vždy náleží 2 buňkám, a proto musíme být obezřetní, abychom některou neznámou neodebrali $2\times$ nebo případně vůbec.

Procházíme tedy celou matici vyjmutých buněk V a postupně odebíráme z matice A , vektoru u (5.43) a vektoru pravé strany Q (5.70) odpovídající prvky potažmo řádky a sloupce. Tlakové neznámé a s nimi související řádky a sloupce matice A a prvky vektoru Q můžeme odebrat stejným způsobem jako neznámé C u fyzikálně-chemického modelu. Vzhledem k tomu, že postupujeme výpočetní sítí „po sloupcích“, i odpovídající neznámé w můžeme z modelu odebrat stejným způsobem. Odebereme vždy neznámou umístěnou na vrchní stěně T buňky (pro ilustraci viz obrázek 5.2). Navíc výpočetní síť vždy vytváříme tak, že terén nikdy nesahá až na vrchní stěnu sítě, takže se nemůže stát, že bychom takto odebrali špatný počet neznámých w .

V případě neznámých u a v je situace poněkud komplikovanější. Opět budu vycházet z buňky vyobrazené na obrázku 5.2. Při odstraňování neznámých v porovnáváme vždy 2 sousední prvky matice V na pozicích (i, j) a $(i, j + 1)$. Podle toho, který je větší, tolik neznámých v odstraníme na příslušné hranici mezi těmito 2 prvky. Analogicky postupujeme v případě neznámé u s tím rozdílem, že porovnáváme prvky matice V na pozicích (i, j) a $(i + 1, j)$. Po celou dobu je pochopitelně nutné udržovat přehled o počtech odebraných neznámých, abychom neodebírali špatné neznámé.

Po vyjmutí příslušných prvků (řádků, sloupců) provedeme výpočet a pro potřeby vykreslení řešení na místa vyjmutých neznámých rychlostí a tlaků vložíme zpět podobně jako v případě fyzikálně-chemického modelu nuly.

Oba výše uvedené algoritmy by se daly přepsat do zobecněného formálního schématu:

- načtu TIFF soubor do Matlabu, tím získám matici nadmořských výšek
- upravím matici nadmořských výšek, abych zjistil, kolik buněk, je třeba odebrat, získám matici V
- sestavím model bez terénu a výpočetní síť vytvořím na míru k terénu
- z modelu vyjmu všechny neznámé, které kolidují s terénem
- upravím okrajové podmínky, aby odpovídaly modelu s terénem

- provedu výpočet úlohy
- do výstupu na místa vyjmutých neznámých vrátím nulové hodnoty, abych mohl provést vizualizaci
- vizualizuji výsledky

6 Numerické experimenty

Následující kapitola ukazuje funkčnost obou modelů popsaných v kapitole 5 na třech konkrétních experimentech. První experiment spočívá ve výpočtu vektorového pole rychlostí na oblasti tvaru kvádru bez překážky. V druhém experimentu je modelováno vektorové pole rychlostí uvnitř stejné oblasti s překážkou. Třetí experiment modeluje šíření částic PM_{10} z lokálního zdroje uvnitř stejné oblasti, jako ve druhém experimentu.

6.1 Srovnání numerických modelů proudění tekutin

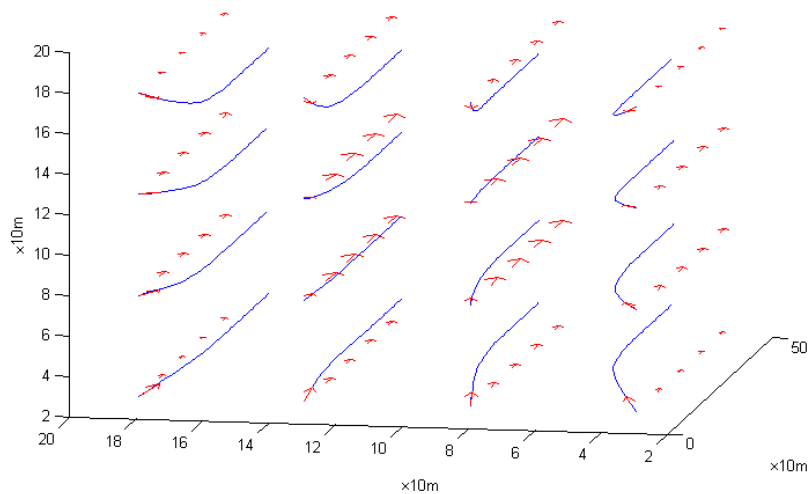
První experiment porovnává rychlostní profil vypočtený v Matlabu mnou implementovaným numerickým modelem s profilem vypočteným pomocí softwarového nástroje Comsol Multiphysics[®], který provádí výpočty na základě MKP. Uvažujeme proudění ve směru osy x uvnitř oblasti Ω tvaru kvádru o rozměrech $500\text{m} \times 200\text{m} \times 200\text{m}$ ¹¹. Tuto oblast jsem pokryl krychlemi o hraně délky 10m . Na inletu Γ_I (stěna $x = 0$) je předepsána Dirichletova okrajová podmínka pro rychlost normálového směru u_0 o velikosti 2m.s^{-1} . Na outletu (stěna $x = 500\text{m}$) je předepsán nulový tlak a homogenní Neumannova podmínka pro normálovou složku rychlosti. Tečné složky rychlostí jsou na obou průtočných stěnách nulové. Na zbylých stěnách je předepsána okrajová podmínka typu „wall“ s nulovou rychlostí pohybu (statická stěna). Veškeré okrajové podmínky jsou popsány blíže v kapitole 5.

Na obrázku 6.1 vidíme rychlostní profil vypočtený mnou implementovaným modelem v Matlabu. Obrázek 6.2 zobrazuje rychlostní profil vypočtený pomocí CFD modulu obsaženém v Comsolu. Vidíme, že při výpočtu v Matlabu se mnohem více projeví okrajové podmínky typu „wall“ než v případě Comsolu. Výše uvedené odlišnosti budou způsobeny jednak rozdílností použitých metod (MKD, MKP). Dále také rozdílností výpočetních sítí, kdy Comsol nepoužívá pro MKP krychlovou síť.

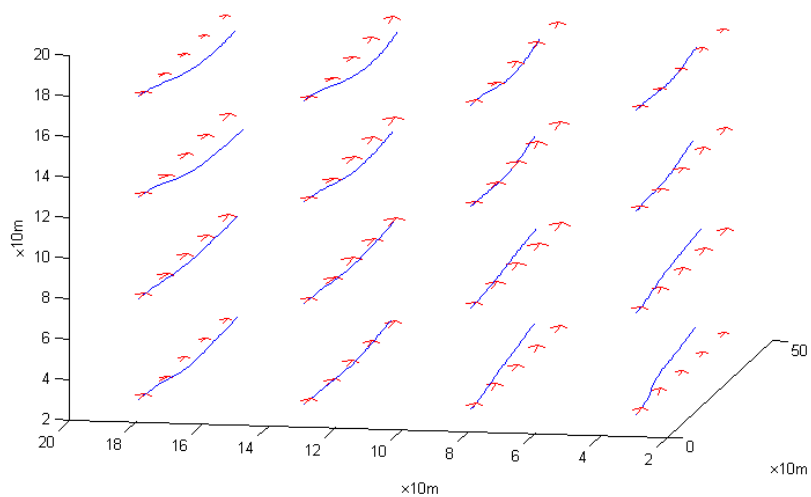
6.2 Srovnání numerických modelů proudění tekutin v úloze s překážkou

Druhý experiment opět porovnává rychlostní profil vymodelovaný výše uvedenými modely. Rozdíl spočívá, že do výpočetní oblasti o rozměrech $500\text{m} \times 200\text{m} \times 200\text{m}$ (tožná s předchozím experimentem) byla umístěna překážka v podobě dvou na sobě položených komolých jehlanů o rozměrech podstavy $100\text{m} \times 100\text{m}$. Horní plocha překážky je umístěna ve výšce 50m . Výpočetní oblast byla v Matlabu opět pokryta krychlemi o délce hrany 10m . Na inletu jsem tentokrát zadal Dirichletovu okrajovou podmínku pro normálovou rychlost o velikosti 10m.s^{-1} . Ostatní okrajové podmínky zůstaly stejné jako v předchozím experimentu. Na stěnách překážky je taktéž předepsána okrajová podmínka typu statická stěna.

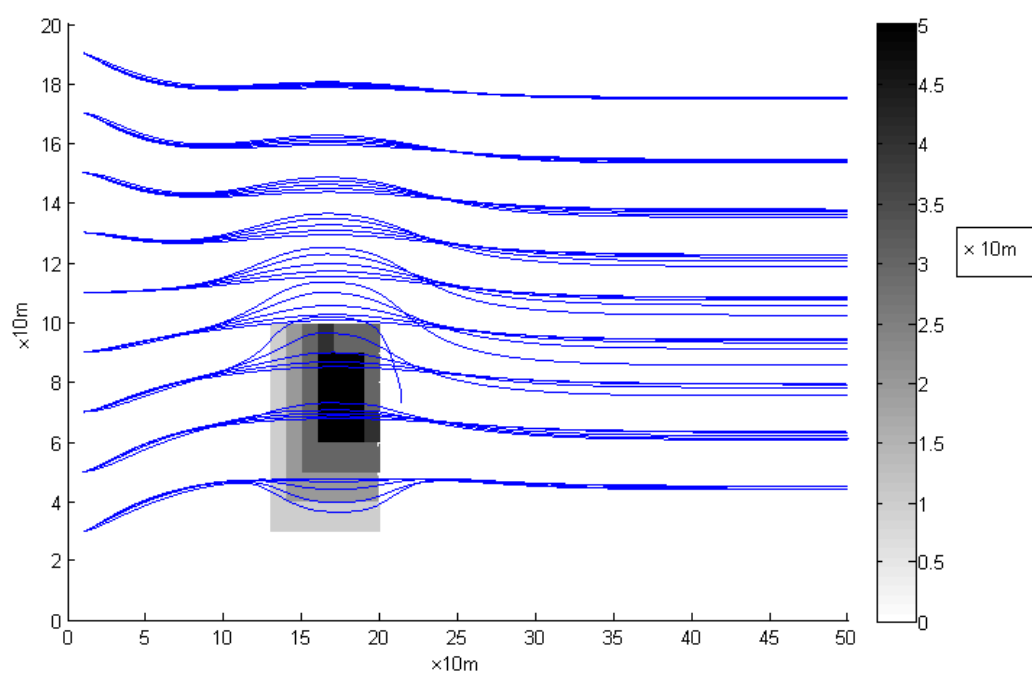
¹¹500m má oblast na délku ve směru osy x .



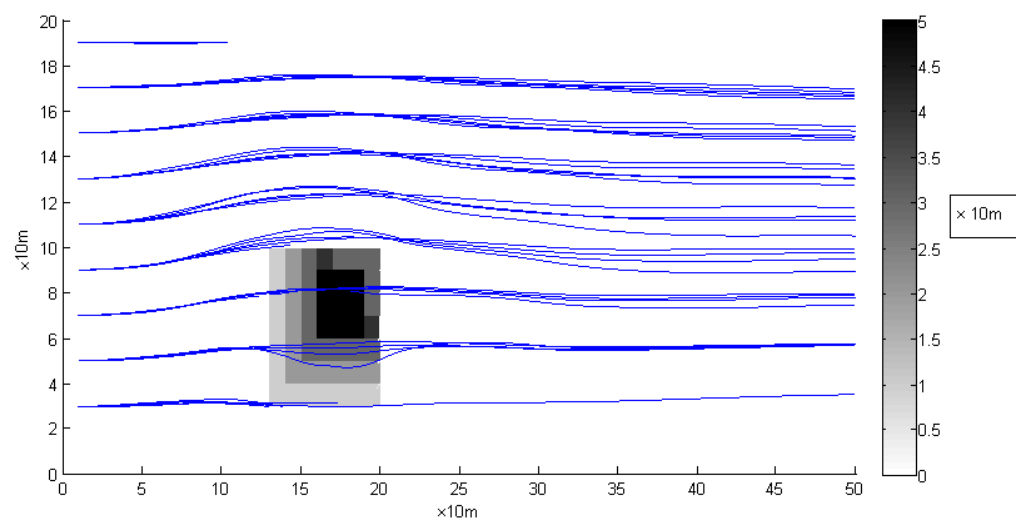
Obrázek 6.1: Rychlostní profil vypočtený numerickým modelem implementovaným v Matlabu



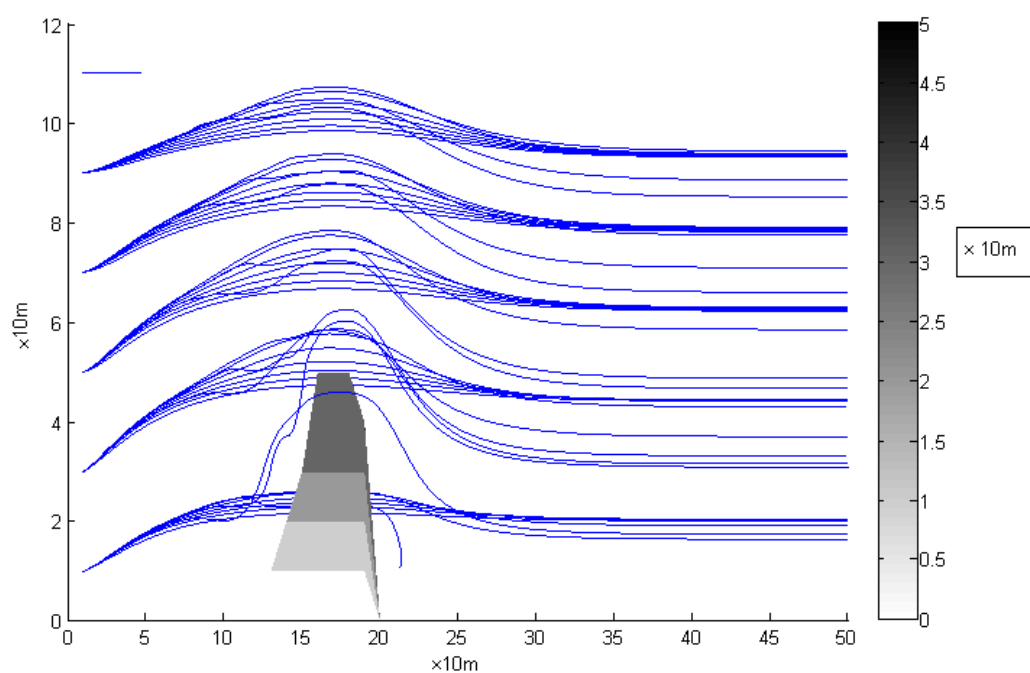
Obrázek 6.2: Rychlostní profil vypočtený v Comsolu



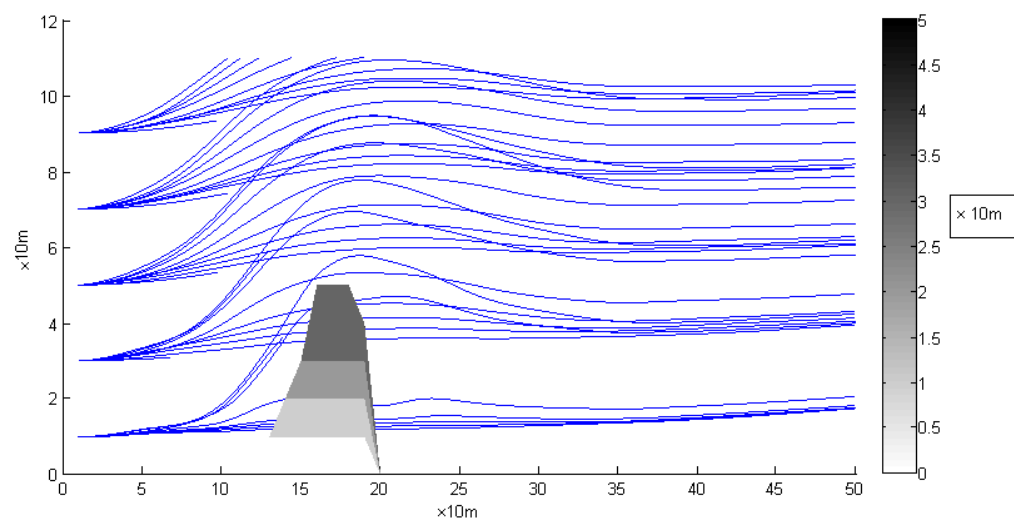
Obrázek 6.3: Rychlostní profil s překážkou - pohled shora



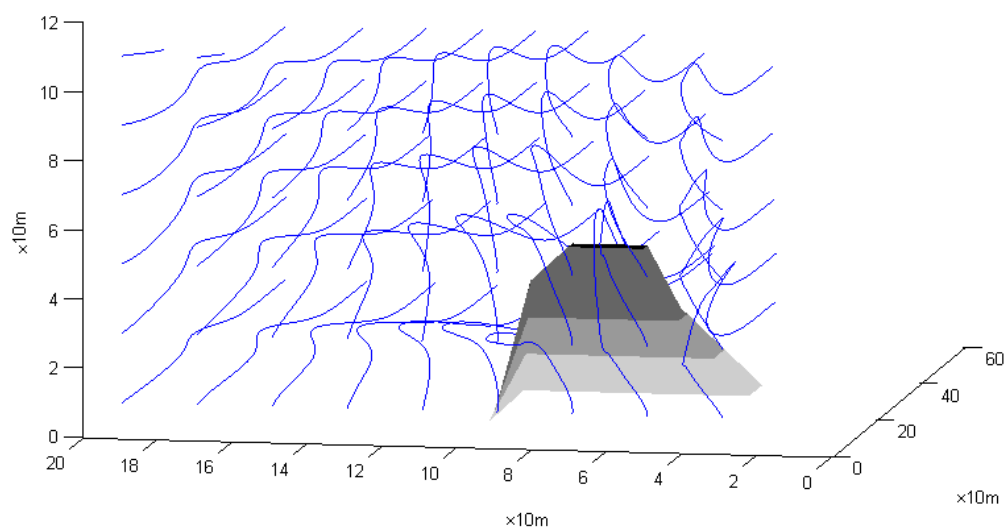
Obrázek 6.4: Rychlostní profil s překážkou - pohled shora (Comsol)



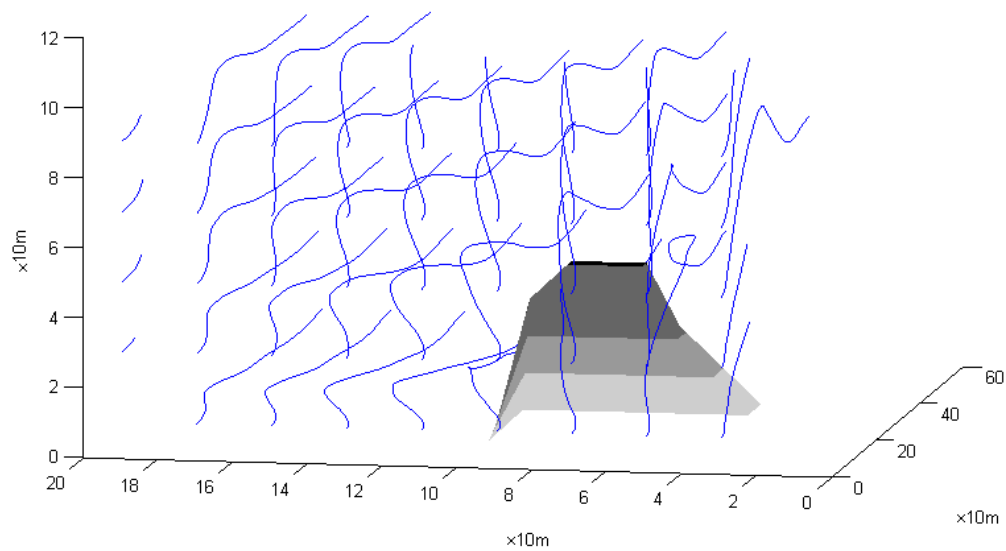
Obrázek 6.5: Rychlostní profil s překážkou - pohled ze strany



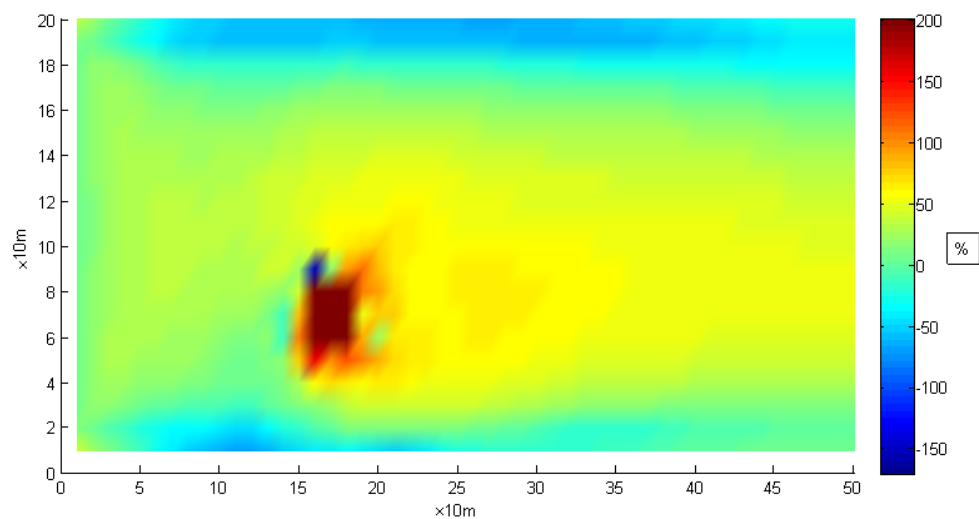
Obrázek 6.6: Rychlostní profil s překážkou - pohled ze strany (Comsol)



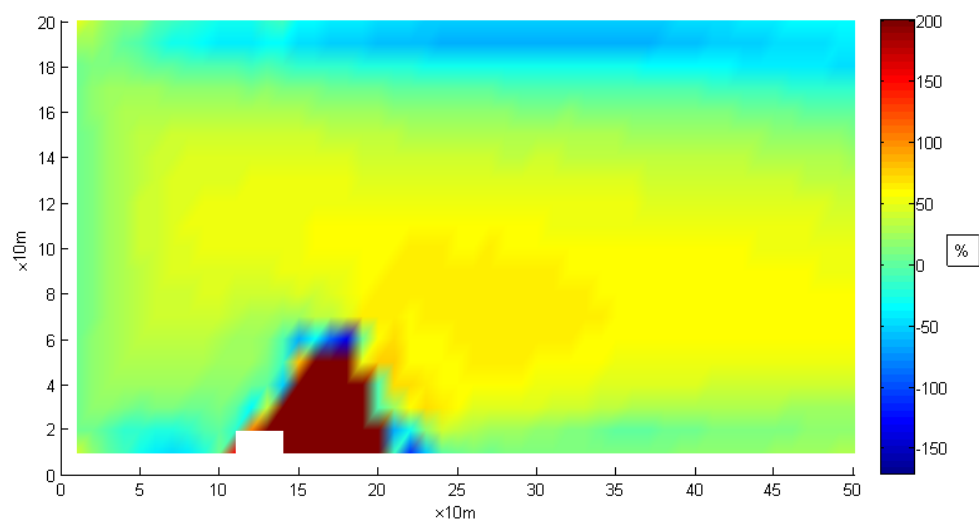
Obrázek 6.7: Rychlostní profil s překážkou



Obrázek 6.8: Rychlostní profil s překážkou (Comsol)



Obrázek 6.9: Rozdíl norem rychlostí s překážkou - horizontální řez ve výšce 50m

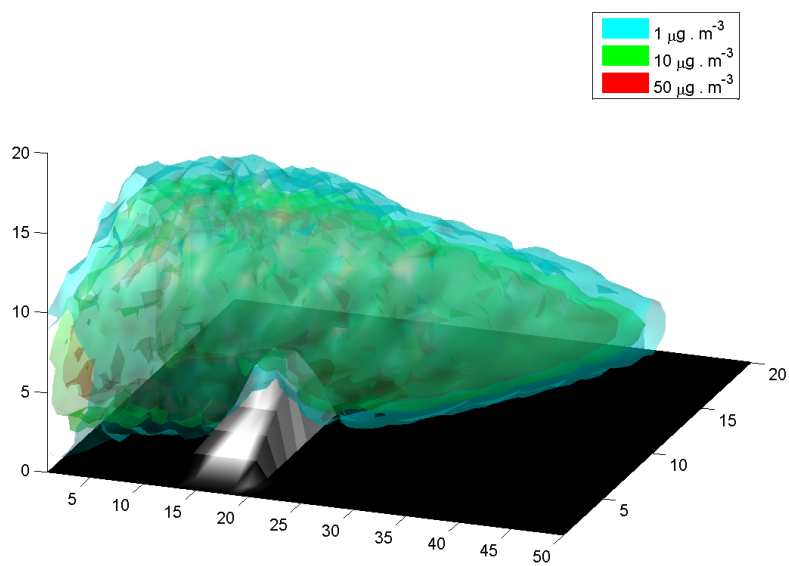


Obrázek 6.10: Rozdíl norem rychlostí s překážkou - vertikální řez nad překážkou

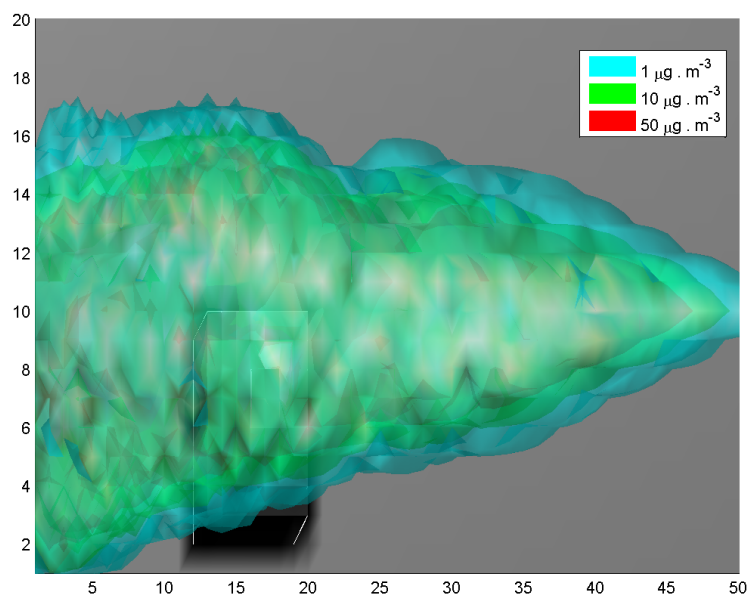
Na obrázcích 6.4 - 6.8 vidíme vždy po dvojicích z různých pohledů srovnání rychlostních profilů z Matlabu a z Comsolu. Vidíme, že v modelu z Matlabu se podobně jako v předchozí úloze více projevily okrajové podmínky typu „wall“. Důvodem rozdílnosti v obtékání překážky jsou zajisté opět rozdílné výpočetní sítě obou modelů a dále také způsob, jakým jednotlivé modely pracují s terénem. Můj model zpracovává terén způsobem popsaným v kapitole 5.4, takže vyjímá celé buňky, kterými prochází terén a tím aproximuje terén méně přesně než Comsol. Rozdílnosti v obtékání překážky se projevují i v grafech 6.9 a 6.10, které zobrazují relativní rozdíly norem rychlostí v procentech.

6.3 Šíření pevných částic

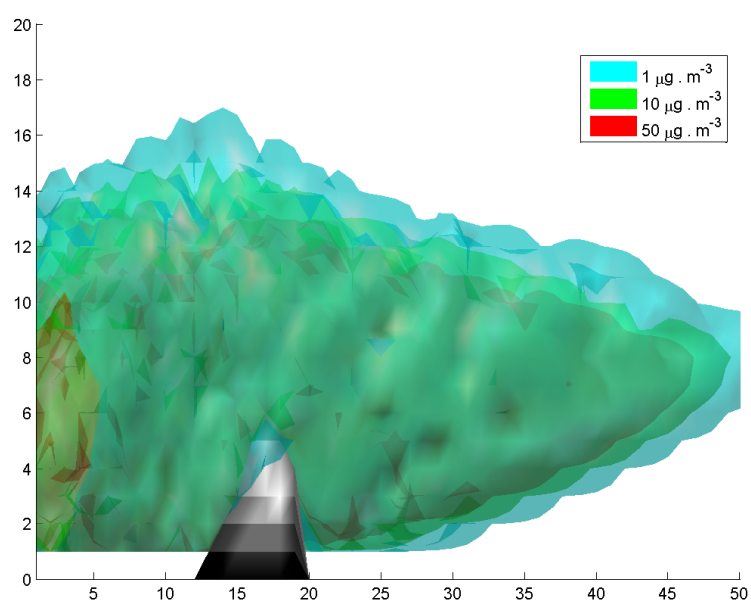
Poslední experiment modeluje šíření pevných částic PM_{10} ze zdroje znečištění o vydatnosti $10g.s^{-1}$ umístěného ve výšce 50m nad zemí. Experiment jsem modeloval na stejné síti jako v předchozím případě. Na počátku byla v celé oblasti předepsána počáteční podmínka nulové koncentrace. Na hranicích oblasti byla předepsána po celou dobu experimentu homogenní Dirichletova podmínka pro hodnotu koncentrace znečišťující látky. Na vstupu jsem použil vektorové pole rychlostí vypočítané mnou implementovaným modelem v předešlém experimentu a difúzní koeficient pro prachové částice z tabulky 4.1. Experiment modeluje šíření prachových částic PM_{10} po dobu 240 sekund. Výstupy v podobě animací z různých pohledů na tento experiment jsou umístěny na příloženém CD - příloha A. Obrázky (6.11) - (6.13) zobrazují stav znečištění uvnitř oblasti v čase 240 sekund.



Obrázek 6.11: Stav znečištění částicemi PM₁₀ v čase 240 sekund.



Obrázek 6.12: Stav znečištění částicemi PM₁₀ v čase 240 sekund - pohled shora



Obrázek 6.13: Stav znečištění částicemi PM₁₀ v čase 240 sekund - pohled ze strany

7 Závěr

Cílem této práce bylo analyzovat, zpracovat a následně i implementovat numerické modely využívané k modelování šíření kontaminantů ovzduším. Tato problematika se skládá ze 2 fyzikálních úloh - modelování proudění tekutin a modelování šíření znečišťující látky. Model proudění tekutin je možné řešit i samostatně, pro modelování šíření znečišťující látky ovzduším však potřebujeme na vstup zadat vektorové pole rychlostí proudící tekutiny uvnitř příslušné oblasti. Po důkladném studiu a analýze této problematiky jsem se rozhodl implementovat oba modely pomocí metody konečných diferencí v jazyce MATLAB[®]. Vzhledem k tomu, že jsem podobně náročné úlohy řešil poprvé, upřednostnil jsem MKD před MKP či MKO, jelikož oproti oběma ostatním metodám je jednodušší ji implementovat. Při implementaci numerického modelu proudění tekutin jsem vycházel z již existujícího modelu pro 2D úlohy, který jsem následně upravil pro 3D úlohy. 3D fyzikálně-chemický model šíření kontaminantů jsem vytvořil zobecněním 1D modelu do 3D.

Aby bylo možné oba výše uvedené modely využít pro reálné úlohy, navrhl a implementoval jsem jako jejich součást i metody pro zahrnutí terénu. Modely jsou schopny na vstupu přijímat terén v podobě standardního formátu, který můžeme získat jako výstup z geoinformačních systémů. Tato skutečnost umožňuje modelovat šíření kontaminantů ovzduším v přirozené krajině popsané geografickými daty z geoinformačních systémů.

Výstupy numerického modelu proudění byly porovnány na konkrétních úlohách s výstupy nástroje Comsol Multiphysics[®]. Vzhledem ke skutečnosti, že se mi nepodařilo do tohoto nástroje zahrnout geodata s reálným terénem vytvořil jsem v Comsolu terén modelový a ten jsem následně zahrnul i do numerického modelu proudění implementovaného v Matlabu. Porovnané výsledky vykazují značné rozdíly, které jsou dle mého názoru způsobeny skutečností, že MKD pracuje pouze s pravidelnými sítěmi a neumožňuje lokální zjemnění na hranicích modelovaných oblastí. Globální zjemnění sítě je však bez paralelní implementace výpočetně extrémně náročné.

Na vstup fyzikálně-chemického modelu jsem umístil vektorové pole rychlostí vypočítané implementovaným numerickým modelem a fyzikálně-chemický model jsem následně testoval na konkrétní úloze. V Comsolu se mi však totožnou úlohu nepovedlo nasimulovat, a proto jsem tyto výstupy nijak neverifikoval. Je nutno podotknout, že oba modely na sobě nejsou nijak závislé, a proto může být vstupní vektorové pole rychlostí fyzikálně-chemického modelu získáno i jinou cestou.

Co se týče srovnání výpočetní náročnosti obou modelů, tak náročnost fyzikálně-chemického modelu je v porovnání s numerickým modelem zanedbatelná. Do budoucna bych se rád zaměřil především na zrychlení numerického modelu. Z důvodu jeho nepříliš uspokojivých výsledků však bude nutné použít místo MKD jinou metodu (pravděpodobně MKO).

Osobně jsem se díky této práci detailněji seznámil s teoretickými aspekty, které se týkají mechaniky tekutin. Dále jsem podrobněji prostudoval procesy konvekce a difúze.

Seznámil jsem se i s modelovacím nástrojem Comsol Multiphysics[®]. Největší přínos pro mne však měla práce především v pochopení základních postupů, pomocí kterých je možné z matematického popisu problému vytvořit numerický model ve 3D. Věřím, že tato práce může čtenáři pochopení těchto postupů usnadnit.

8 Reference

- [1] BRDIČKA, Miroslav, Ladislav SAMEK a Bruno SOPKO. *Mechanika kontinua*. Vyd. 4., rev. a upr. Praha: Academia, 2011, 878 s. Gerstner. ISBN 978-80-200-2039-0.
- [2] DRÁBKOVÁ, Sylva. *Mechanika tekutin*. Ostrava, 2007. ISBN 978-80-248-1508-4. Dostupné z: <http://www.338.vsb.cz/PDF/Drabkova-Mechanikatekutin.pdf>
- [3] KOZUBKOVÁ, Milada. *Modelování proudění tekutin, FLUENT, CFX*. 1. vyd. Ostrava, 2008. Dostupné z: <http://www.338.vsb.cz/PDF/Kozubkova-Fluent.pdf>
- [4] RYŠKA, Václav. *Matematické modelování znečištění ovzduší*. Ostrava, 2013. Dostupné z: <http://www.fei.vsb.cz/export/sites/fei/k470/cs/theses/bakalari/2013/rys0020.pdf>. Bakalářská práce. Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava.
- [5] HASAL, Martin. *Numerické řešení Navierových-Stokesových rovnic pomocí metody konečných prvků*. Ostrava, 2011. Dostupné z: <http://www.fei.vsb.cz/export/sites/fei/k470/cs/theses/mgr/2011/pdfs/has081.pdf>. Diplomová práce. Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava.
- [6] JANALÍK, Jaroslav. Viskozita tekutin a její měření [online]. Ostrava, 2010 [cit. 2015-04-30]. Dostupné z: <http://www.338.vsb.cz/PDF/TEXTviskozitaPDF.pdf>
- [7] Stlačitelnost – Wikipedie. [online]. [cit. 2015-02-27]. Dostupné z: <http://cs.wikipedia.org/wiki/Stla%C4%8Ditelnost>
- [8] Reynolds number - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-01]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Reynolds_number
- [9] HAVLÍK, Vladimír a Ivana MAREŠOVÁ. *Hydraulika 10: příklady*. Vyd. 2. Praha: Vydavatelství ČVUT, 2001, 243 s. ISBN 80-01-02403-2.
- [10] Janalík, J., Štáva, P.: *Mechanika tekutin*, Skriptum, Ostrava: VŠB-TU Ostrava, 2002. 124 s. ISBN 80-248-0038-1. Dostupné z: <http://www.338.vsb.cz/PDF/Janalik,Stava-MechanikaTekutin.pdf>
- [11] Derivation of the Navier-Stokes equations - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-02]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Derivation_of_the_Navier%E2%80%93Stokes_equations
- [12] Navier-Stokes equations - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-02]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Navier%E2%80%93Stokes_equations
- [13] BAKKER, André. *Applied Computational Fluid Dynamics: Lecture 6 - Boundary Conditions*. In: [online]. [cit. 2015-03-06]. Dostupné z: <http://www.bakker.org/dartmouth06/engs150/06-bound.pdf>

-
- [14] Incompressible flow – CFD-Wiki, the free CFD reference. [online]. [cit. 2015-03-06]. Dostupné z: http://www.cfd-online.com/Wiki/Incompressible_flow
 - [15] Mach number - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-06]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Mach_number
 - [16] JOHNSON, Claes. Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method. Dover ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1987, 278 s. Dover books on mathematics. ISBN 05-213-4758-0.
 - [17] Archiv počasí, klima České republiky | In-pocasi. [online]. [cit. 2015-03-06]. Dostupné z: <http://www.in-pocasi.cz/archiv/>
 - [18] TOMÁŠ, Blejchař. Turbulence-Modelování proudění - CFX. Ostrava, 2010. ISBN 978-80-248-2606-6. Dostupné z: <http://www.person.vsb.cz/archivcd/FS/Tur/Turbulence.pdf>
 - [19] MILAN, Hokr. Transportní procesy [online]. 2005 [cit. 2015-03-07]. Dostupné z: http://www.nti.tul.cz/cz/images/3/3e/Hokr_TRP_skripta_05-09-23.pdf
 - [20] MARKERT, Vorgelegt von Bernd. Weak or strong on coupled problems in continuum mechanics. [Online-Ausg.]. Stuttgart: Inst. fu[section] [u.a.], 2010. ISBN 39-373-9920-8. Habilitační práce.
 - [21] Air pollution - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-07]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Air_pollution
 - [22] Znečištění ovzduší v Česku – Wikipedie. [online]. [cit. 2015-03-09]. Dostupné z: http://cs.wikipedia.org/wiki/Zne%C4%8Di%C5%A1t%C4%9Bn%C3%AD_ovzdu%C5%A1%C3%AD_v_%C4%8Cesku
 - [23] Znečišťující látky – Wikipedie. [online]. [cit. 2015-03-09]. Dostupné z: http://cs.wikipedia.org/wiki/Zne%C4%8Di%C5%A1%C5%A5uj%C3%ADc%C3%AD_l%C3%A1tky
 - [24] Přehled měřených veličin. [online]. [cit. 2015-03-09]. Dostupné z: <http://www.ovzduisizlin.cz/info/prehled-merenych-velicin>
 - [25] JANÁČOVÁ, Dagmar a Hana CHARVÁTOVÁ. Vybrané statě z procesního inženýrství 5: Difúzní koeficient [online]. [cit. 2015-03-09]. Dostupné z: http://www.utb.cz/file/42260_1_1/
 - [26] PRITCHARD, D. T. a J. A. CURRIE. Diffusion of coefficients of carbon dioxide, nitrous oxide, ethylene and ethane in air and their measurement. Journal of Soil Science. 1982, vol. 33, issue 2, s. 175-184. DOI: 10.1111/j.1365-2389.1982.tb01757.x.

-
- [27] Convection–diffusion equation - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-10]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Convection%E2%80%93diffusion_equation
 - [28] KUKAČKA, Libor. Charakteristiky proudění a difúze velikosti mikroměřítku uvnitř městské zástavby. Praha, 2009. Diplomová práce. Univerzita Karlova v Praze.
 - [29] Advection - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-12]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/Advection>
 - [30] Diffusion - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2015-03-12]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion>
 - [31] MARTÍNEZ, Isidoro. Mass diffusivity data. [online]. [cit. 2015-03-13]. Dostupné z: <http://webserver.dmt.upm.es/~isidoro/dat1/Mass%20diffusivity%20data.pdf>
 - [32] Thermal-FluidsPedia | Thermophysical Properties: Diffusion coefficients in air at 1 atm | Thermal-Fluids Central. [online]. [cit. 2015-03-13]. Dostupné z: https://www.thermalfluidscentral.org/encyclopedia/index.php/Thermophysical_Properties:_Diffusion_coefficients_in_air_at_1_atm
 - [33] SMOLÍK, Jiří, Ludmila MAŠKOVÁ, Naděžda ZÍKOVÁ, Lucie ONDRÁČKOVÁ a Jakub ONDRÁČEK. Deposition of suspended fine particulate matter in a library. Heritage Science. 2013, vol. 1, issue 1, s. 7-. DOI: 10.1186/2050-7445-1-7. Dostupné z: <http://www.heritagesciencejournal.com/content/pdf/2050-7445-1-7.pdf>
 - [34] KOZUBEK, Tomáš, Tomáš BRZOBOHATÝ, Marta JAROŠOVÁ, Václav HAPLA a Alexandros MARKOPOULOS. Lineární algebra s Matlabem [online]. 2012 [cit. 2015-03-19]. Dostupné z: http://mi21.vsb.cz/sites/mi21.vsb.cz/files/unit/linearni_algebra_s_matlabem.pdf
 - [35] BRANDNER, Marek, Jiří EGERMAIER a Hana KOPINCOVÁ. Numerické metody pro řešení evolučních parciálních diferenciálních rovnic [online]. 2012 [cit. 2015-03-21]. Dostupné z: http://mi21.vsb.cz/sites/mi21.vsb.cz/files/unit/numericke_metody_pro_reseni_evolucnich_pdr.pdf
 - [36] DEMIR, Veysel. Simulation of Electromagnetic Fields: The Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Method and Its Applications. In: [online]. [cit. 2015-03-21]. Dostupné z: <http://ieee.rackoneup.net/rrvs/10/Finite-Difference%20Time-Domain%20Method%20and%20Its%20Applications.pdf>
 - [37] CHEN, Long. Finite difference (MAC) for Stokes equations. In: [online]. [cit. 2015-04-04]. Dostupné z: <http://www.math.uci.edu/~chenlong/226/MACStokes.pdf>

A Fyzikálně-chemický model - animace

Animace výsledků numerického experimentu z kapitoly 6.3 jsou umístěny na přiloženém CD ve složce „fyzikalne_chemicky_model“.